

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

Д.В. Савченко

**ОСНОВИ ОБРОБКИ ТА ВІЗУАЛІЗАЦІЇ
ФІЗИЧНИХ ДАНИХ В
ПРОГРАМНОМУ СЕРЕДОВИЩІ
ORIGINPRO 8
КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ**

*Рекомендовано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як навчальний посібник для здобувачів ступеня бакалавра за освітньою
програмою «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів»
за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія»*

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2021

Рецензенти

Воронов С.О., завідуючий кафедри прикладної фізики КПІ
ім. Ігоря Сікорського, д-р. техн. наук, професор

Лисенко О.М., завідуючий кафедри конструювання
електронно-обчислювальної апаратури КПІ ім. Ігоря
Сікорського, д-р. техн. наук, професор

*Гриф надано Методичною радою КПІ ім. Ігоря Сікорського (протокол № 7 від 13.05.2021 р.) за
поданням Вченої ради фізико-математичного факультету (протокол № 04 від 29.04.2021 р.)*

Електронне мережне навчальне видання

Савченко Дарія Вікторівна, д-р. фіз.-мат. наук

ОСНОВИ ОБРОБКИ ТА ВІЗУАЛІЗАЦІЇ ФІЗИЧНИХ ДАНИХ В ПРОГРАМНОМУ СЕРЕДОВИЩІ ORIGINPRO 8 КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ

Основи обробки та візуалізації фізичних даних в програмному середовищі OriginPro 8: Комп'ютерний практикум [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 104 «Фізика та астрономія» / Д. В. Савченко ; КПІ ім. Ігоря Сікорського. – Електронні текстові дані (1 файл: 5,61 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021. – 111 с.

Посібник містить методичні вказівки до виконання комп'ютерних практикумів з навчальної дисципліни «Основи обробки та візуалізації фізичних даних в програмному середовищі OriginPro». Метою посібника є ознайомлення студентів з основними функціями OriginPro для розв'язання конкретних прикладних задач. Особливу увагу приділено задачам візуалізації та обробки спектроскопічних даних.

Навчальний посібник буде корисним студентам фізичних та технічних спеціальностей при обробці та візуалізації експериментальних даних.

© Д.В. Савченко, 2021
© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2021

ЗМІСТ

Вступ.....	
1. Комп'ютерний практикум №1. Початок роботи з програмою. Введення значень до таблиці даних. Імпорт даних. Перетворення значень всередині таблиці даних.....	
2. Комп'ютерний практикум №2. Побудова 2D графіків. Побудова графіків функцій. Експорт та збереження даних.....	
3. Комп'ютерний практикум №3. Оформлення графіків.....	
4. Комп'ютерний практикум №4. Побудова 3D графіків.....	
5. Комп'ютерний практикум №5. Апроксимація графічних даних.....	
6. Комп'ютерний практикум №6. Аналіз та обробка графічних даних. Аналіз піків кривих.....	
7. Комп'ютерний практикум №7. Аналіз та обробка графічних даних. Диференціювання, інтегрування та Фур'є трансформація.....	
Рекомендована література.....	

ВСТУП

Даний посібник являє собою методичні вказівки до виконання комп'ютерних практикумів з дисципліни «Основи обробки та візуалізації фізичних даних в програмному середовищі OriginPro». Видання складено відповідно до робочої програми дисципліни для студентів спеціальності 104 «Фізика та астрономія» спеціалізації «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів».

Посібник містить 7 комп'ютерних практикумів за основними темами навчальної дисципліни: основи роботи з програмним середовищем OriginPro 8, побудова 2D графіків, оформлення графіків, побудова 3D графіків, апроксимація графічних даних, аналіз піків кривих, диференціювання, інтегрування та Фур'є трансформація графічних даних.

Кожен практикум містить теоретичні відомості та конкретні приклади застосування програмного середовища OriginPro 8 для візуалізації та обробки даних фізичних експериментів.

Основна мета посібника – надати студентові допомогу в опануванні теоретичних положень дисципліни щодо використання програмного середовища OriginPro 8 для розв'язання конкретних прикладних задач.

Всі зауваження та побажання, спрямовані на покращення посібника, будуть прийняті авторкою з подякою.

Початок роботи з програмою. Введення значень до таблиці даних. Імпорт даних. Перетворення значень всередині таблиці даних.

Мета роботи: засвоєння основи роботи з програмою.

Завдання роботи:

- навчитися вводити значення до таблиці даних;
- навчитися імпортувати дані;
- навчитися перетворювати значення всередині таблиці даних.

Теоретичні відомості

Одним з найважливіших етапів науково-дослідної роботи є обробка експериментальних даних та графічне відображення отриманих результатів. Програмне середовище OriginPro являє собою промисловий стандарт для збору та візуалізації даних, отриманих під час різних експериментів, зокрема експериментів, що проводяться в фізичних лабораторіях. Програмним середовищем OriginPro користується порядку півмільйона науковців та інженерів у комерційних підприємствах, академіях наук, університетах та державних лабораторіях по всьому світу.

Проект та робоча область програмного середовища OriginPro

Програмне середовище OriginPro відображає робочий простір, який містить (Рис. 1.1): меню, рядок стану, робоче поле, панелі інструментів.

В програмному середовищі OriginPro робота організована за принципом проектів. Проект OriginPro подібний до папки файлів, до якого входить набір зв'язаних матеріалів типу графіків, даних та функцій, пов'язаних з визначеною темою. Тобто проект в OriginPro являє собою сукупність вікон, а також наборів даних та змінних.

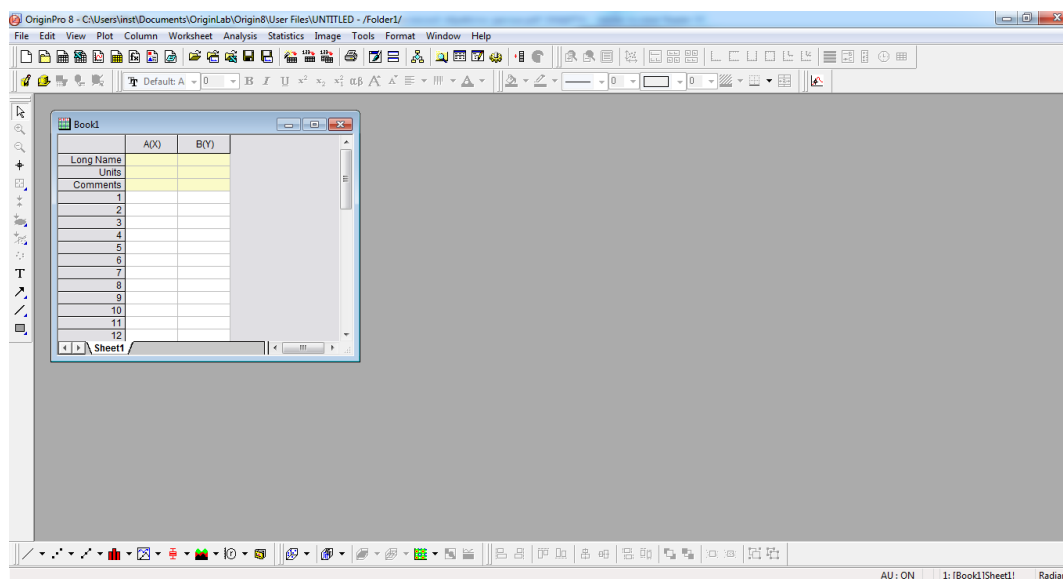


Рисунок 1.1 – Робочий простір програмного середовища OriginPro.

При запуску програми в робочому просторі відкривається вікно з таблицею даних **Book1**.

Треба зауважити, що будь-яке вікно у програмному середовищі OriginPro має своє ім'я. Це ім'я може бути змінено, для цього потрібно зробити це вікно активним, натиснувши на нього лівою кнопкою мишки. Потім треба натиснути правою кнопкою мишки на назву вікна, і у контекстному меню, що з'явиться, обрати пункт **Properties...** (Рис. 1.2).

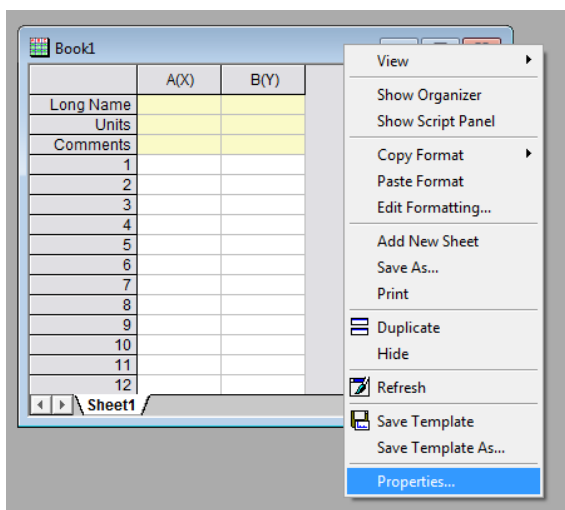


Рисунок 1.2 – Контекстне меню для редагування властивостей вікна **Book1**.

Далі у діалоговому вікні **Window properties** можна змінити довге та коротке ім'я вікна, а також за потребою додати коментарі (Рис. 1.3). Також існує можливість дублювати вікна за допомогою функції **Duplicate** (див. Рис. 1.2).

Введення значень до таблиці даних

Вводити чисельні значення до таблиці даних можна як вручну за допомогою клавіатури, так і шляхом експорту даних з інших файлів.

Для введення значень до таблиці даних **Book1** вручну потрібно встановити курсор на необхідній комірці таблиці і почати введення даних за допомогою клавіатури. Запис даних відбувається у десятинному форматі, або в форматі з рухомою комою (Рис. 1.4). Наприклад, 10^{-4} буде зображатись як 1E-4.

За замовчуванням таблиця даних містить два стовпчики А та В. Щоб додати більше стовпчиків потрібно зробити активним потрібну таблицю даних та обрати в меню **Column** пункт **Add New Columns...** (Рис. 1.5). Далі у вікні, що з'явиться, обирається кількість стовпчиків, яку потрібно додати.

Для введення чисельних значень до таблиці даних шляхом імпорту даних з інших файлів потрібно обрати в меню **File** підпункт **Import** (Рис. 1.6).

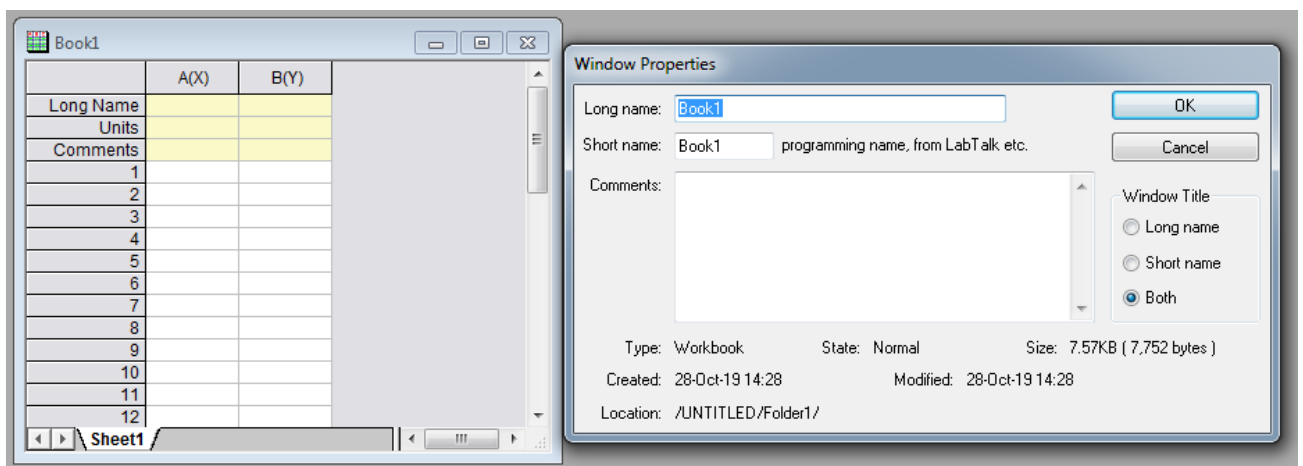


Рисунок 1.3 – Діалогове вікно **Window properties** для зміни імені та додавання коментарів до вікна **Book1**.

	A(X)	B(Y)
Long Name		
Units		
Comments		
1	1	1.15
2	2	1000000
3	3	1E-4
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10		
11		
12		

Рисунок 1.4 – Приклад введення чисельних значень вручну до таблиці даних.

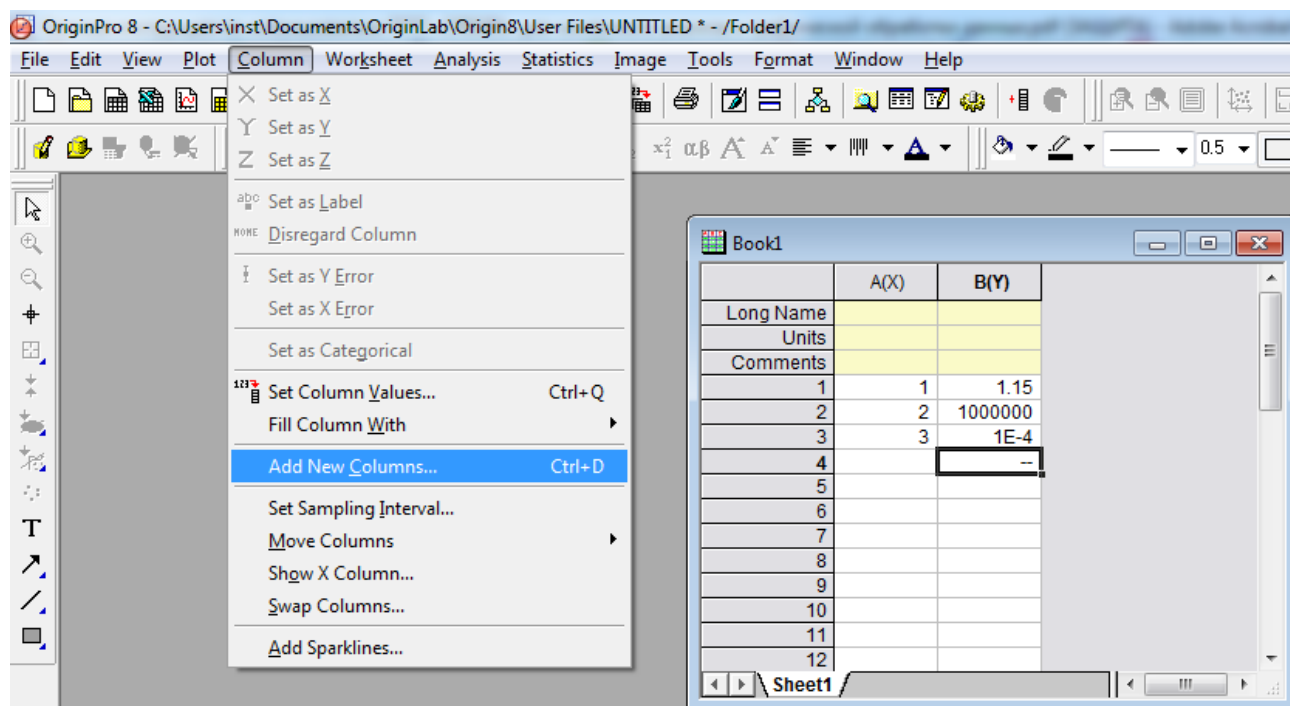


Рисунок 1.5 – Додавання нових стовпчиків до таблиці даних.

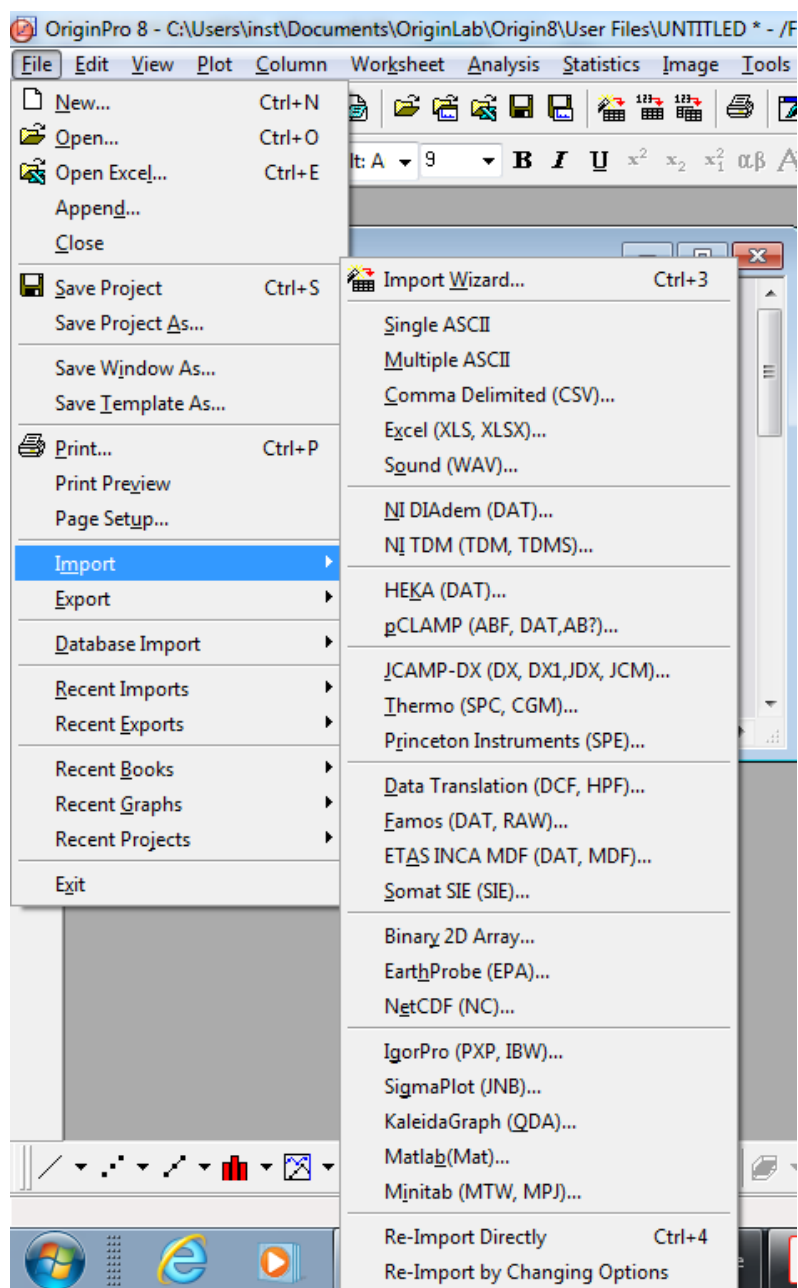


Рисунок 1.6 – Імпорт значень до таблиці даних.

Програмне середовище OriginPro підтримує імпорт з наступних форматів даних:

- ASCII (American standard code for information interchange) (*.txt);
- CSV (Comma-separated values) (*.csv);
- файли, створені у Microsoft Office Excel (*.xls, *.xlsx);
- WAV (waveform audio format) (*.wav);

- файли, створені у прикладному програмному забезпеченні для збору даних та керування ними від National Instruments (*.dat, *.tdm, *.tdms);
- файли, створені у програмних середовищах фірми HEKA (*.dat);
- файли, створені у програмному середовищі для збору та аналізу електрофізіологічних даних в патч-кламп експериментах pCLAMP (*.abf, *.dat, *.ab?);
- файли стандарту обміну даними між комп'ютеризованими лабораторними інструментами JCAMP-DX (Joint Committee on Atomic and Molecular Physical Data Exchange Standards) (*.dx, *.dx1, *.jdx, *.jcm);
- файли, створені у програмних середовищах фірми Thermo (*.spc, *.cgm);
- файли, створені у програмних середовищах фірми Princeton Instruments (*.spe);
- файли, створені у програмних середовищах фірми Data Translation (*.dcf, *.hpf);
- файли, створені у програмному середовищі FAMOS (fast analysis and monitoring of signals) (*.dat, *.raw);
- файли, створені у програмному середовищі INCA (Integrated Calibration and Application Tool) фірми ETAS (*.dat, *.mdf);
- файли, створені у програмному середовищі Somat SIE (*.sie);
- файли у форматі двовимірного масиву даних (Binary 2D Array) (*.img, *.b2d);
- файли, створені у програмному середовищі EarthProbe (*.epa);
- файли, створені у бінарному форматі файлів NetCDF (Network Common Data Form), який є стандартом для обміну науковими даними (*.nc);
- файли, створені у програмному середовищі Igor Pro (*.pxp, *.ibw);
- файли, створені у програмному середовищі SigmaPlot (*.jnb);
- файли, створені у програмному середовищі KaleidaGraph (*.qda);

- файли, створені у програмному середовищі Matlab (*.mat);
- файли, створені у програмному середовищі Minitab (*.mtw, *.mpj).

Для редагування властивостей кожного зі стовпчиків у таблиці даних потрібно виділити активувати таблицю даних та виділити необхідний стовпчик, натиснувши лівою кнопкою мишки на його коротке ім'я зверху (Рис. 1.7).

Перетворення значень всередині таблиці даних

Програмне середовище OriginPro дозволяє виконувати різноманітні математичні дії над стовпчиками у таблиці даних. Для цього потрібно виділити необхідний стовпчик (як показано на Рис. 1.7) і у пункті верхнього меню **Column** обрати підпункт **Set column values...** (Рис. 1.8). Далі з'явиться діалогове вікно **Set Values** (Рис. 1.9), у якому можна вводити математичні дії для значення стовпчика. У нашому випадку (Рис. 1.9) математичні дії будуть вводитись для виділеного стовпчика B(Y), яке позначається як col(B). Відповідно, значення стовпчика A(X) позначатимуться як col(A).

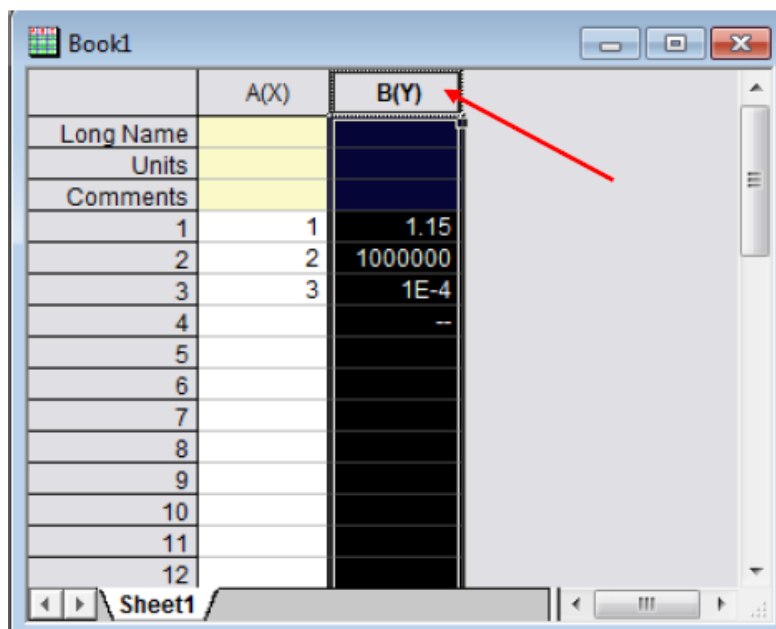


Рисунок 1.7 – Виокремлення необхідного стовпчика у таблиці даних.

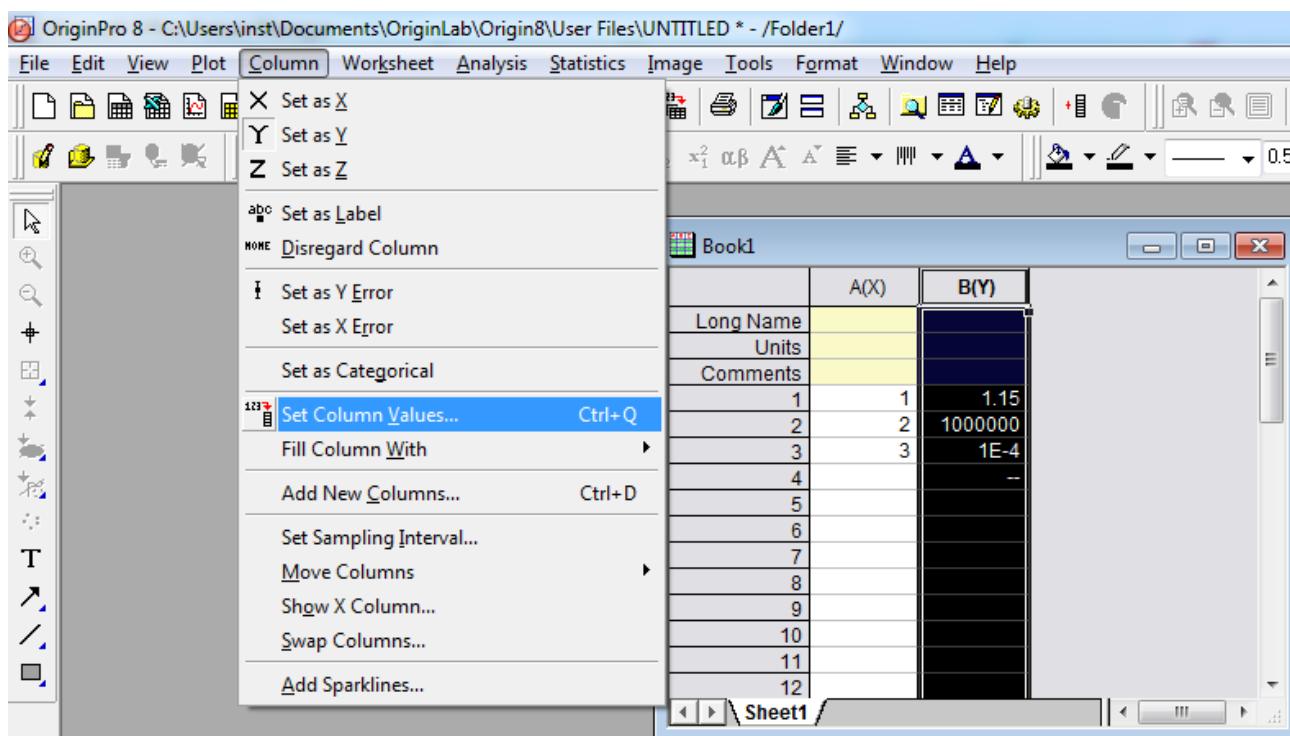


Рисунок 1.8 – Обрання опції **Set column values...** для редагування значень у стовпчику таблиці даних.

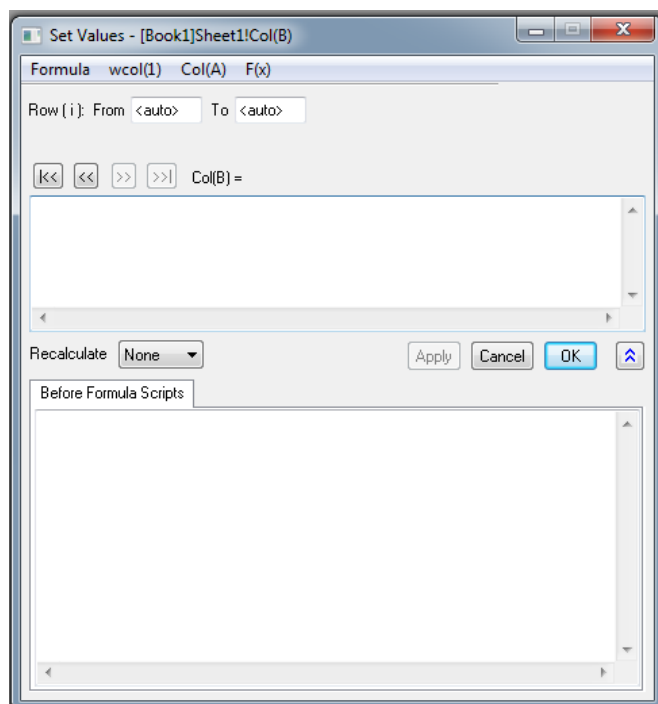


Рисунок 1.9 – Діалогове вікно **Set Values** для редагування значень у стовпчику таблиці даних.

На Рис. 1.10 наведено приклад простого редагування значень стовпчику С у діалоговому вікні **Set Values** із використанням даних зі стовпчиків А та В.

Окрім простих математичних дій редагування значень стовпчиків може проводитись із застосуванням різноманітних математичних функцій. Для цього у діалоговому вікні **Set Values** потрібно обрати пункт меню **F(x)** (Рис. 1.11). Приклад застосування математичних функцій для редагування значень стовпчику наведено на Рис. 1.12.

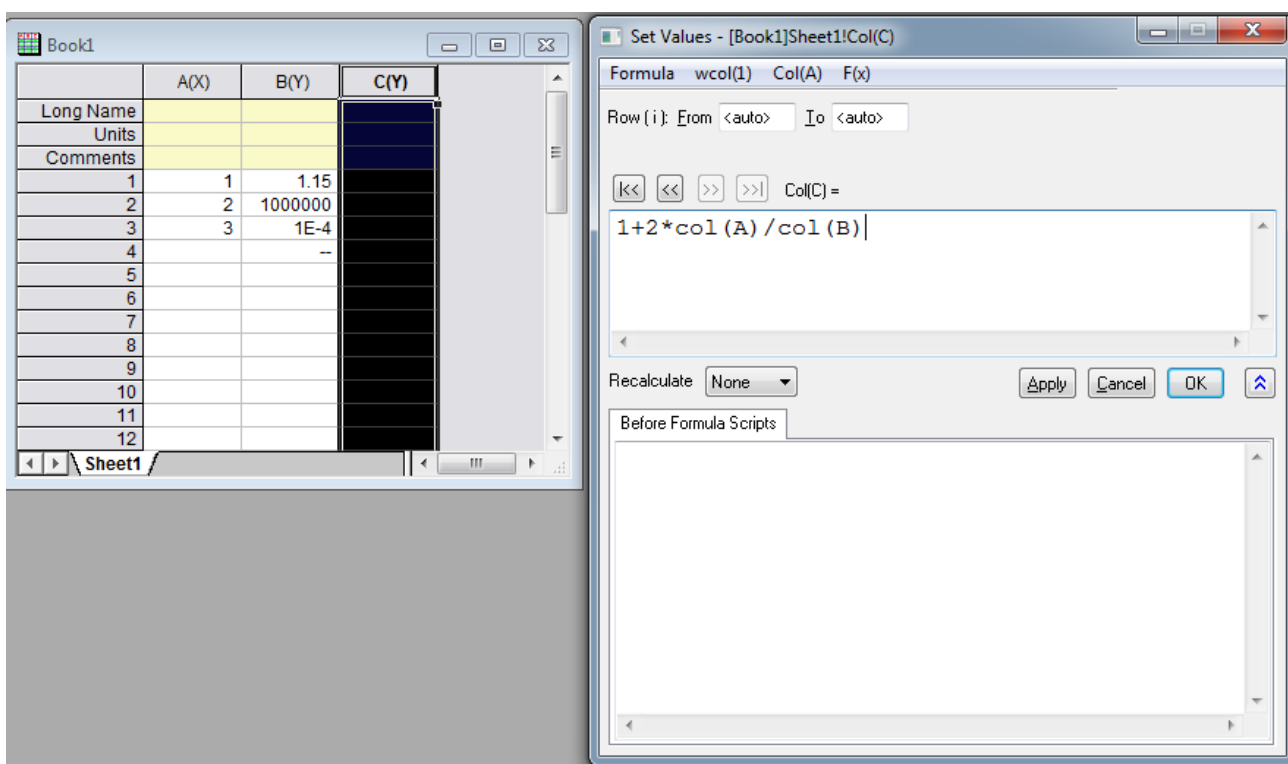


Рисунок 1.10 – Приклад редагування значень стовпчику С у діалоговому вікні **Set Values**.

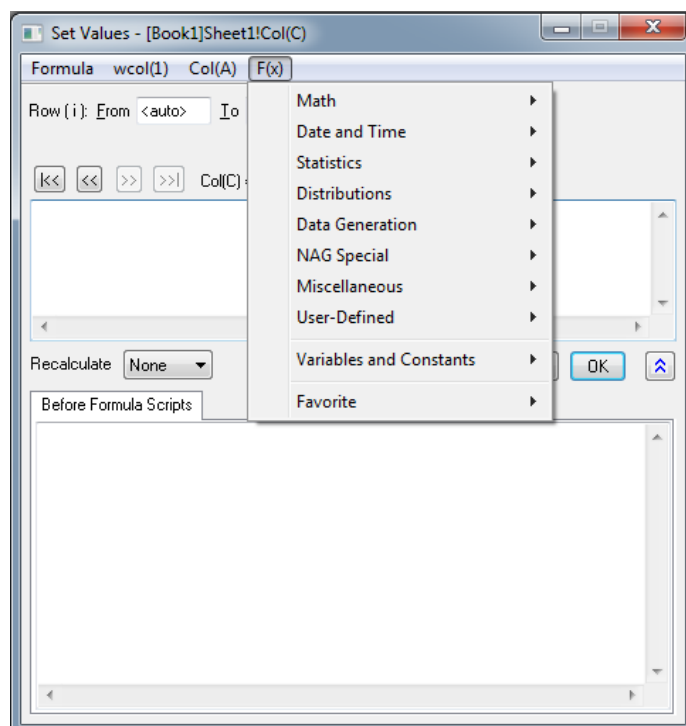


Рисунок 1.11 – Пункт меню **F(x)** у діалоговому вікні **Set Values** для застосування функцій до редагування значень стовпчиків.

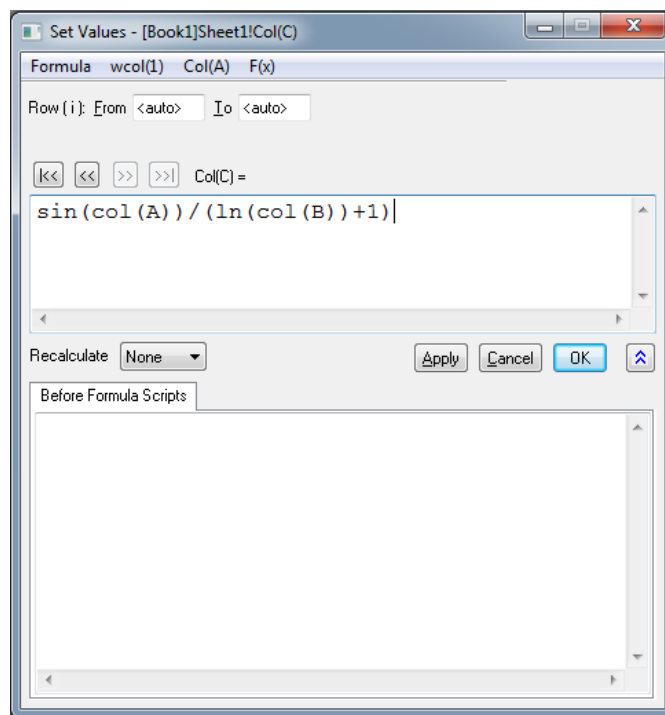


Рисунок 1.12 – Приклад застосування функцій з меню **F(x)** до редагування значень стовпчику **C** у діалоговому вікні **Set Values**.

Побудова 2D графіків. Побудова графіків функцій. Експорт та збереження даних.

Мета роботи: засвоєння основи побудови 2D графіків у програмному середовищі OriginPro.

Завдання роботи:

- навчитися будувати найпростіші 2D графіки у декартовій (пряма по точкам, сплайн-інтерполяція, графік по точкам) та полярній системах координат;
- навчитися будувати графіки функцій;
- навчитися експортувати та зберігати отримані дані.

Теоретичні відомості

Добре відомо, що двовірний (2D) графік – це такий графік, у якому положення точки визначається двома величинами. Двовірні графіки зазвичай будують в декартовій (прямокутній) та полярній системах координат.

Декартова система задається двома перпендикулярними прямими: горизонтальна пряма X – вісь абсцис, вертикальна Y – вісь ординат, а точка перетину осей – початок координат.

Полярна система координат складається з заданої фіксованої точки O (полюса), концентричних кіл з центром в полюсі та променів, що виходять з точки O , причому промінь OX називають полярною віссю. Положення будь-якої точки M в полярних координатах задається додатним числом $\rho = |OM|$, яке називається полярним радіусом, та числом ϕ , що дорівнює величині кута XOM , яке називається полярним кутом. Числа ρ та ϕ є полярними координатами точки M .

Крім інших можливостей в програмному середовищі OriginPro можна будувати 2D графіки в режимі сплайн-інтерполяції. Дослівно сплайн

перекладається як гнучка лінійка. Раніше процедура сплайн-інтерполяції використовувалась при виконанні креслярських робіт наступним чином: спочатку на аркуші паперу зображувались точки, які потрібно було поєднати, потім біля кожної точки, трохи вище та трохи нижче, утикались булавки так, щоб кожна точка знаходилась би поміж двома булавками. Між двома булавками утворювався просвіт, що являв собою своєрідні ворота, в які укладали гнучку лінійку («лекало»), що забезпечувало плавне з'єднання точок. Розвиток чисельних методів сплайн-інтерполяції дозволив їх застосування зокрема в програмному середовищі OriginPro.

Побудова простих 2D графіків в декартовій системі координат

Побудова прямої по точкам

Для побудови прямої лінії по точках потрібно ввести та виділити необхідні значення у таблиці даних і обрати у верхньому меню **Plot**, підпункт **Line** і далі обрати **Line** (Рис. 2.1). На Рис. 2.2 наведено приклад побудови прямої по точках **Line**.

Побудова графіка сплайн-інтерполяції по точках

Для побудови сплайна потрібно ввести та виділити необхідні значення у таблиці даних і обрати у верхньому меню **Plot**, підпункт **Line** і далі обрати **Spline** (Рис. 2.3). На Рис. 2.4 наведено приклад побудови графіка сплайн-інтерполяції **Spline** по точках.

Побудова графіка по точках

Для побудови графіка по точках потрібно ввести та виділити необхідні значення у таблиці даних і обрати у верхньому меню **Plot**, підпункт **Symbol** і далі обрати **Scatter** (Рис. 2.5). На Рис. 2.6 побудови графіка по точках **Scatter**.

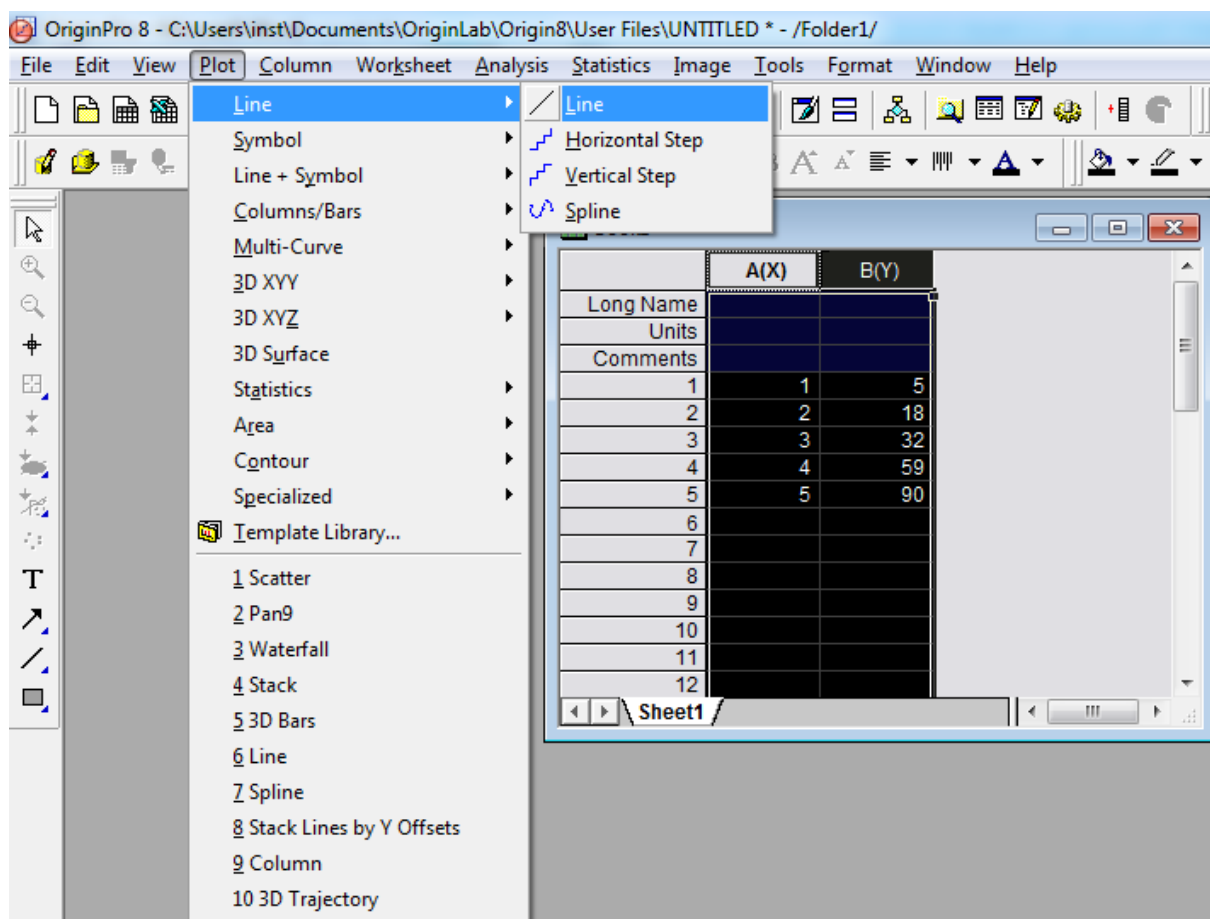


Рисунок 2.1 – Вибір опції побудови графіка прямої по точках **Line**.

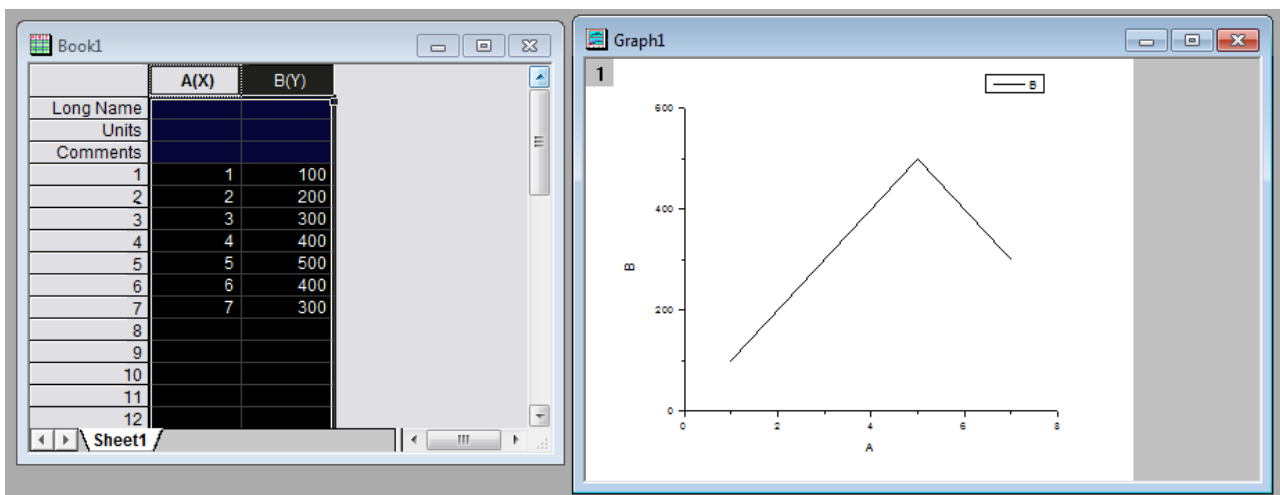


Рисунок 2.2 – Приклад побудови прямої по точках **Line**.

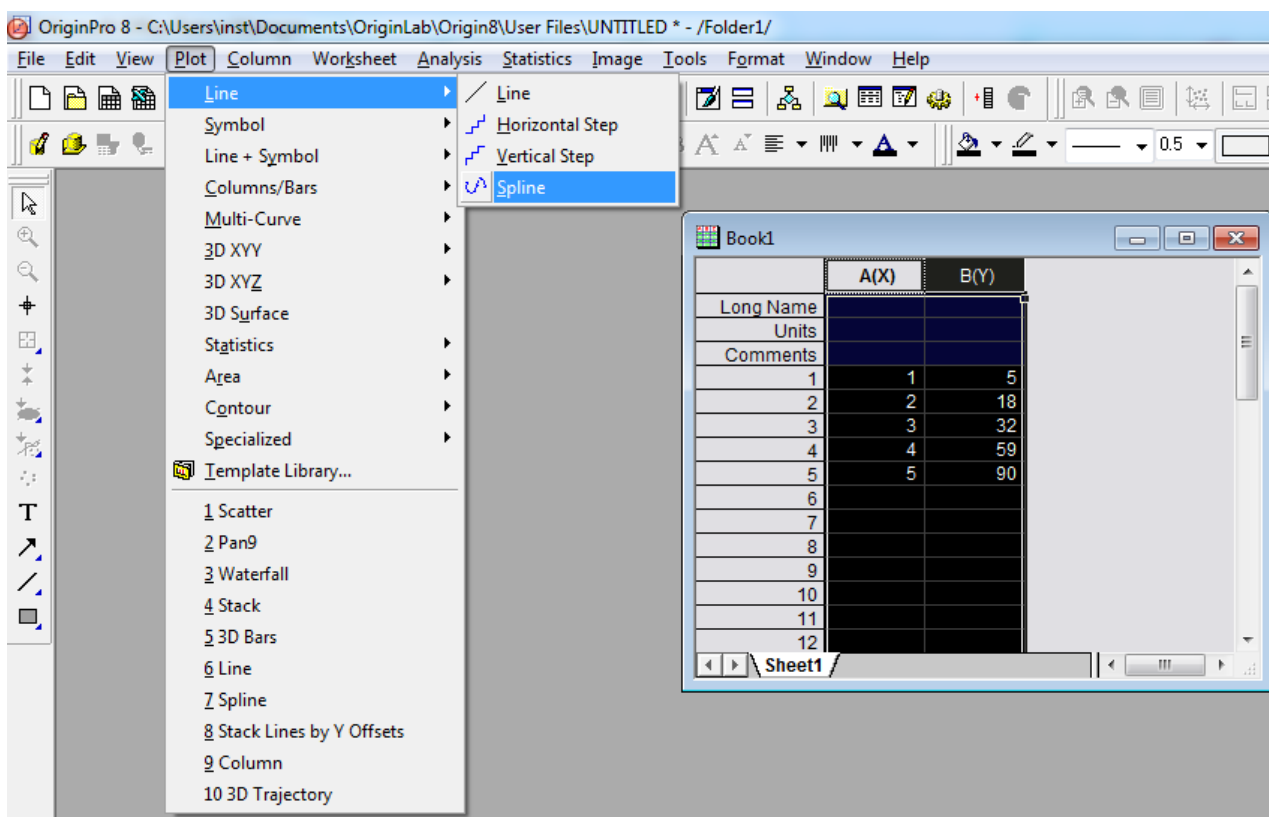


Рисунок 2.3 – Вибір опції побудови графіка сплайн-інтерполяції **Spline**.

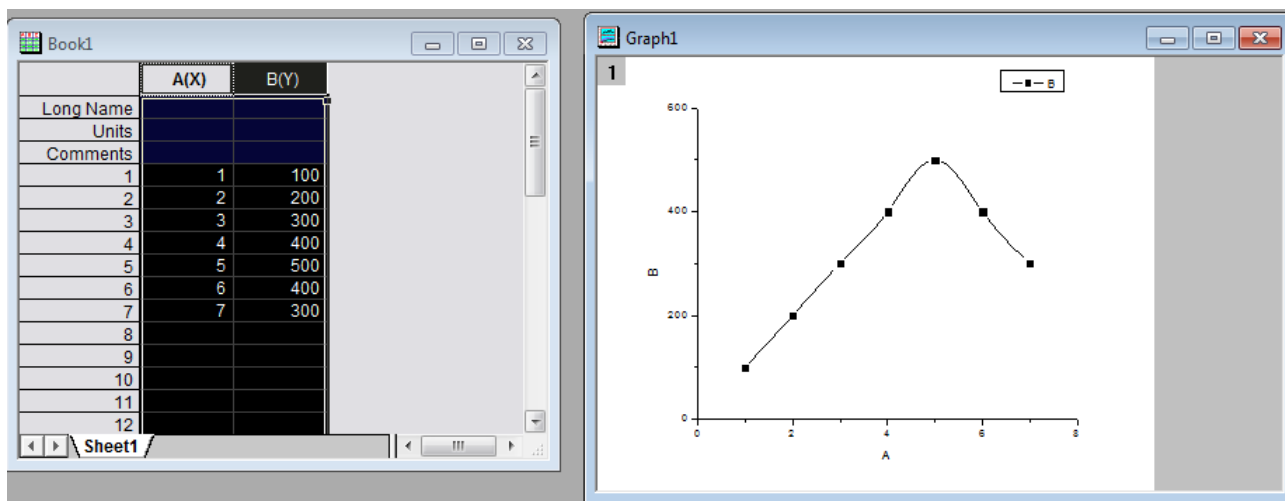


Рисунок 2.4 – Приклад побудови графіка сплайн-інтерполяції **Spline** по точках.

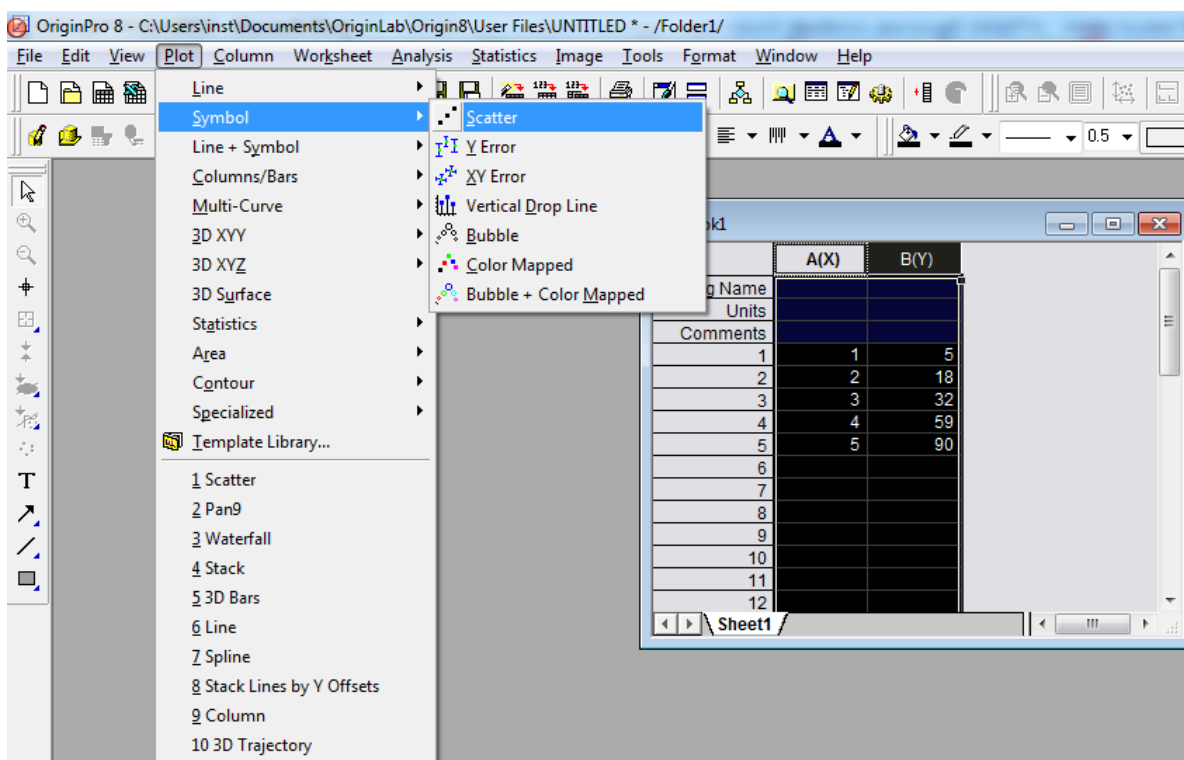


Рисунок 2.5 – Вибір опції побудови графіка по точках **Scatter**.

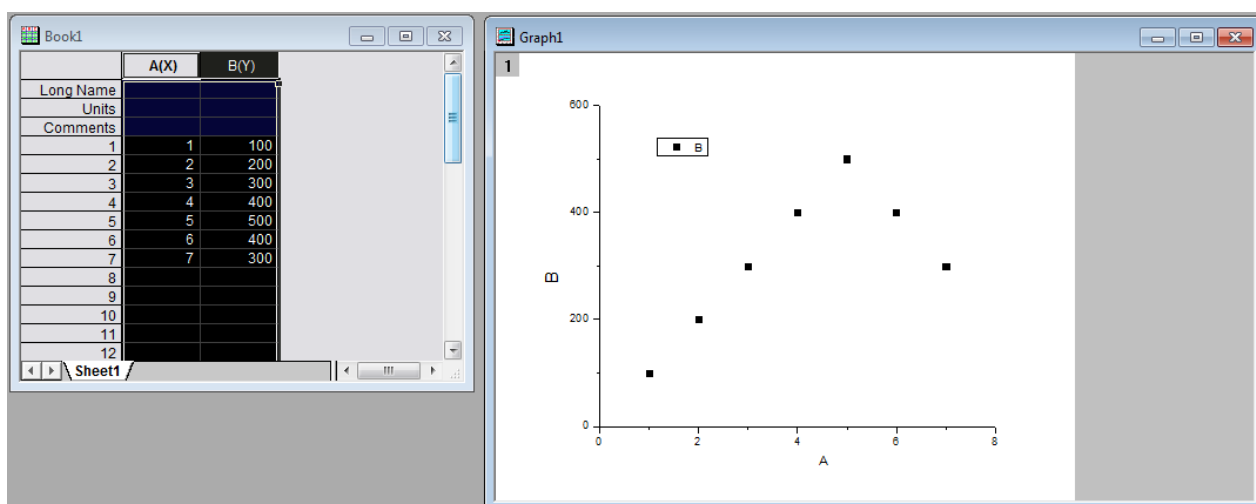


Рисунок 2.6 – Приклад побудови графіка по точках **Scatter**.

Побудова графіка із врахуванням похибок

Для побудови графіка по точках із врахуванням похибок значень, введених у стовпчику Y, потрібно додати новий стовпчик до таблиці даних (Рис. 1.5), ввести значення похибки до цього стовпчику і задати його значення як похибку

значень стовпчику Y. Для цього потрібно виділити стовпчик зі значенням похибок і вказати, що це похибка значень, введених у стовпчику Y, обравши у меню **Column** підпункт **Set as Y Error** (Рис. 2.7). Потім виділяємо всі три стовпчики у таблиці даних і обираємо у верхньому меню **Plot**, підпункт **Symbol** та **Scatter**. В результаті матимемо графік по точках із врахуванням похибок значень, введених у стовпчику Y (Рис. 2.8).

Існує також можливість автоматично задавати процентну похибку значень, введених у стовпчику Y. Для цього потрібно побудувати графік по точках, як показано на Рис. 2.6. Далі активувати вікно зі створеним графіком та обрати у меню **Graph** підпункт **Add Error Bars...** (Рис. 2.9). У діалоговому вікні **Error Bars**, що відкриється, вказати процентну похибку значень, потім натиснути **OK** (Рис. 2.10). В результаті на графіку з'являться позначки похибок значень, введених у стовпчику Y, як було показано на Рис. 2.8.

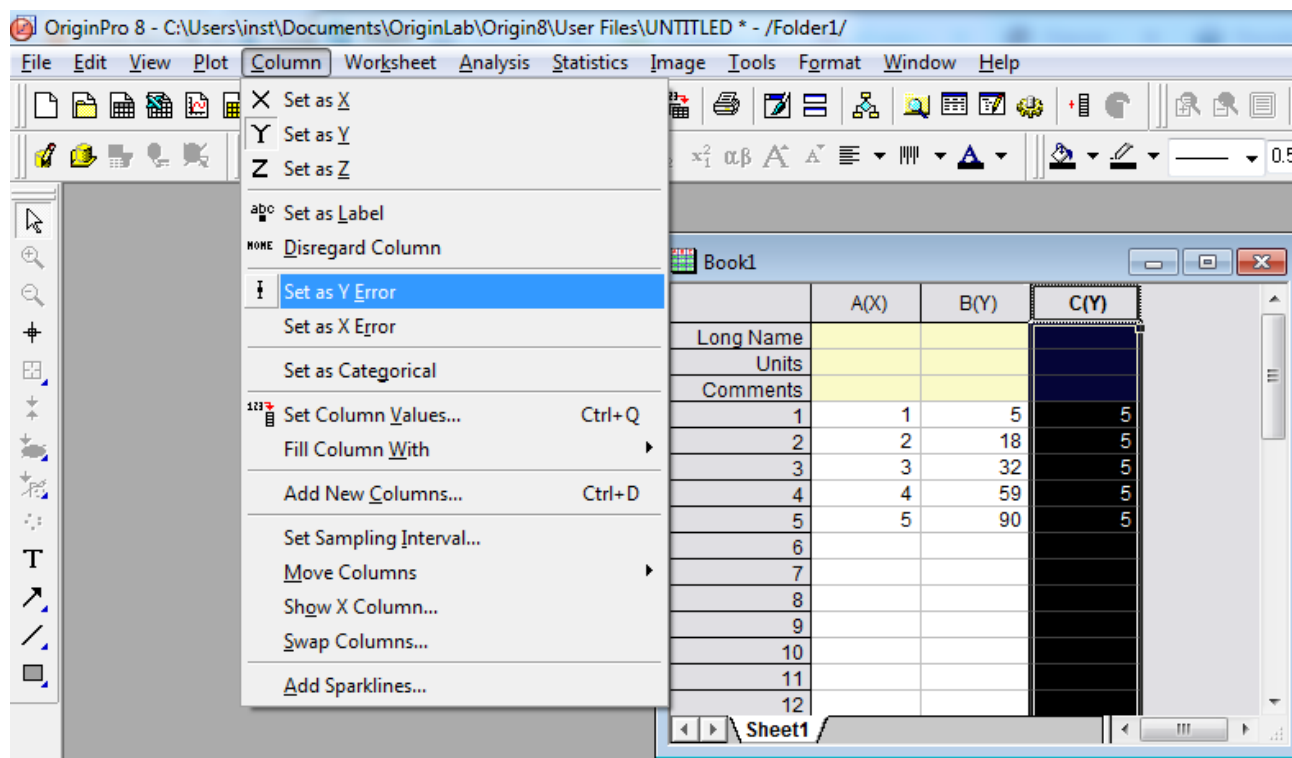


Рисунок 2.7 – Встановлення значень у стовпчику C як похибок у значеннях, введених колонки B, шляхом опції **Set as Y Error**.

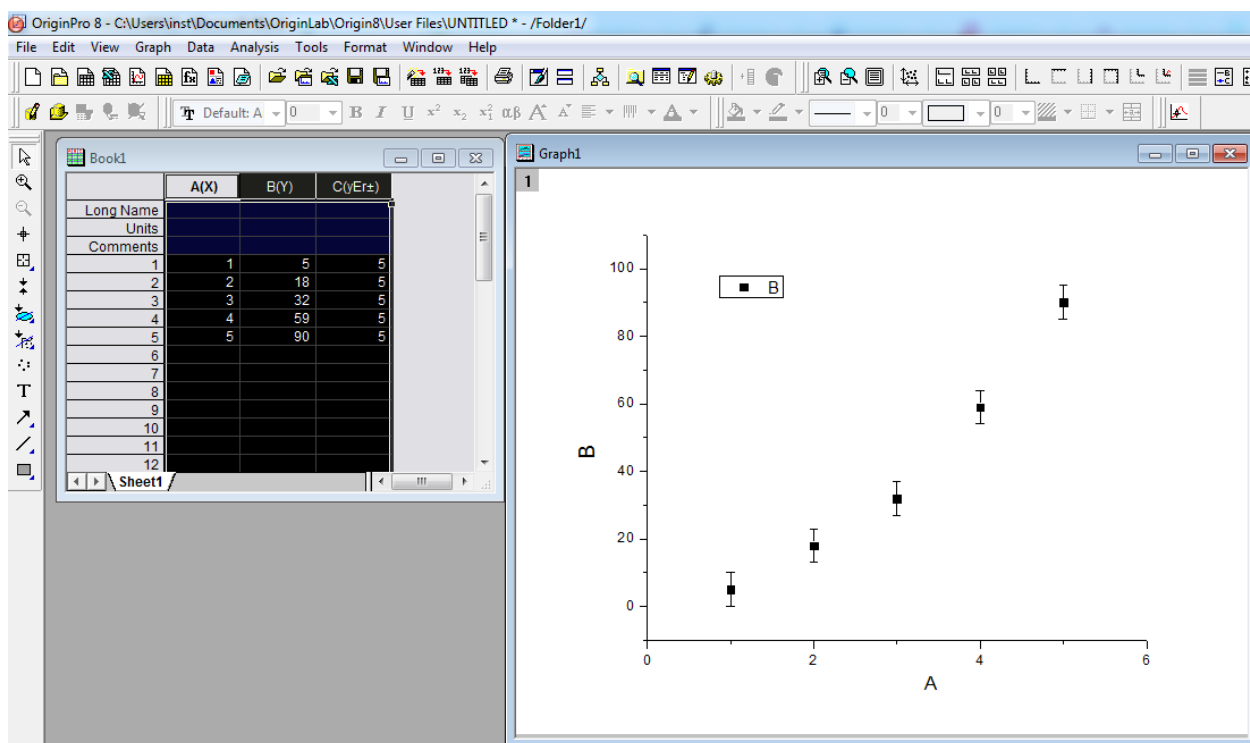


Рисунок 2.8 – Приклад побудови графіка по точках із врахуванням похибок значень, введених у стовпчику Y.

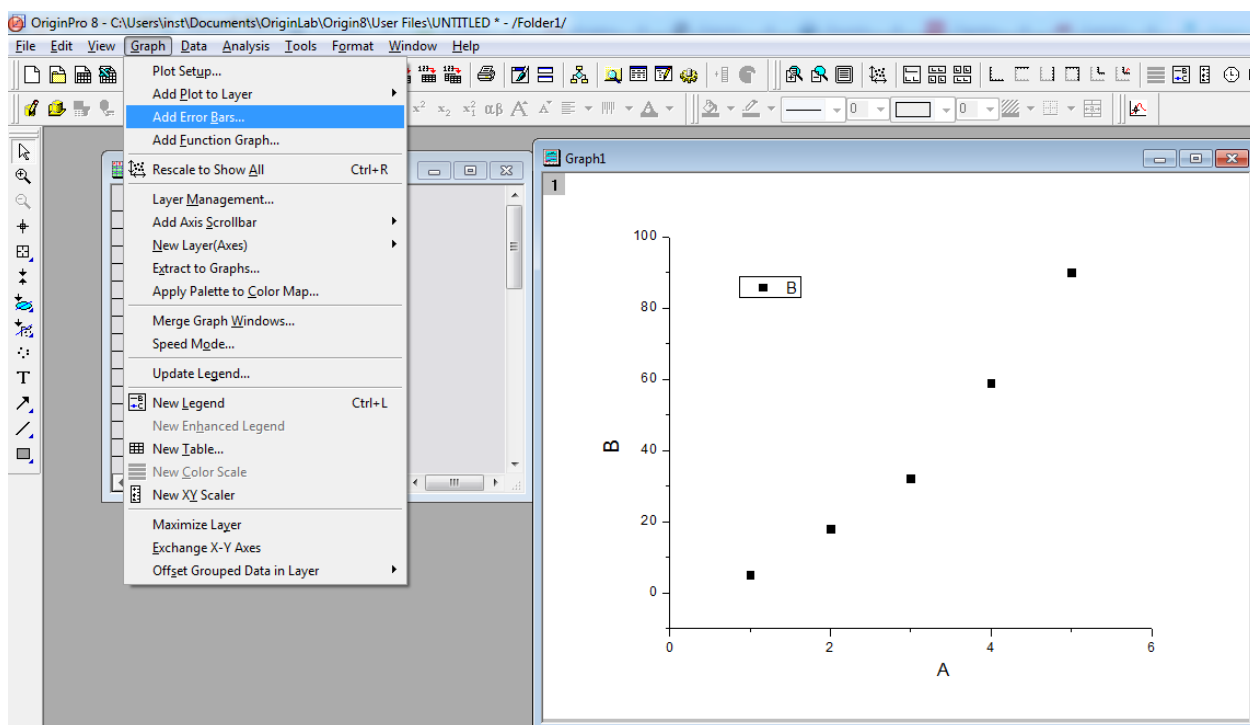


Рисунок 2.9 – Вибір опції встановлення процентної похибки значень **Add Error Bars...**

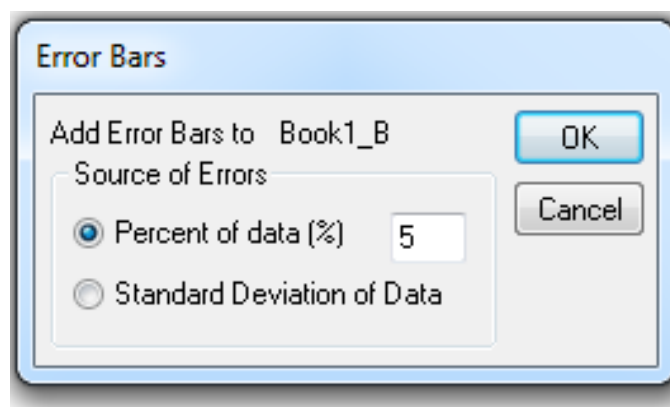


Рисунок 2.10 – Діалогове вікно **Error Bars**.

Побудова графіків функцій

У програмному середовищі OriginPro є можливість будувати графіки різноманітних математичних функцій. Для використання цієї опції потрібно створити вікно графіка, обравши в меню **File** підпункт **New...** (Рис. 2.11, зліва). Далі у діалоговому вікні **New** обрати **Graph** та натиснути **OK** (Рис. 2.11, справа).

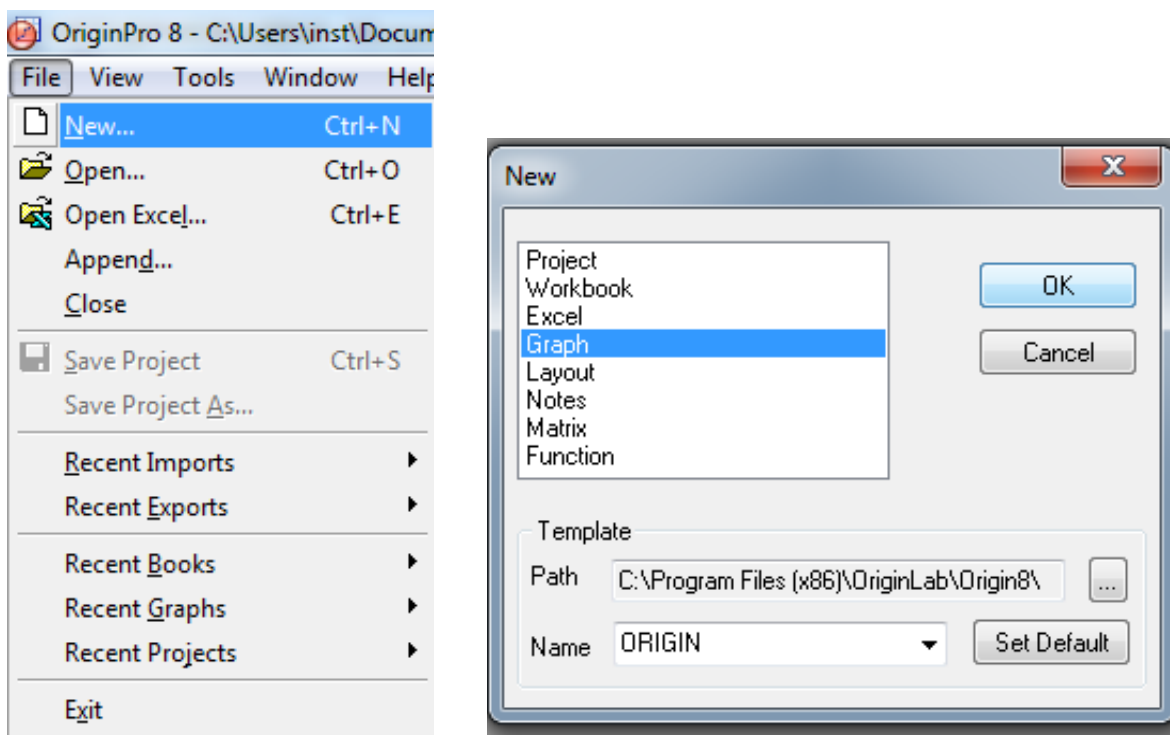


Рисунок 2.11 – Процедура створення нового вікна **Graph**.

Потім потрібно зробити активним створене вікно графіку **Graph1** та обрати в меню **Graph** підпункт **Add Function Graph...**(Рис. 2.12). У діалоговому вікні **Plot Details** що відкриється, у підпункті **Function**, кнопкою **Add** можна додавати різноманітні функції за замовчуванням для побудови графіку **F1(x)** (Рис. 2.13), зокрема:

- тригонометричні функції ($\cos(x)$, $\sin(x)$, $\tan(x)$, $\cosh(x)$, $\sinh(x)$, $\operatorname{atan}(x)$, $\operatorname{asin}(x)$, $\operatorname{acos}(x)$);
- функції Бесселя різного порядку ($J_0(x)$, $J_1(x)$, $J_n(x)$, $Y_0(x)$, $Y_1(x)$, $Y_n(x)$);
- бета функції ($\beta(z, w)$, $\operatorname{incbeta}(x, a, b)$);
- функції помилок ($\operatorname{erf}(x)$, $\operatorname{inverf}(x)$);
- експоненціальну функцію ($\exp(x)$);
- натуральний логарифм гамма-функції ($\Gamma(x)$);
- логарифмічні функції ($\ln(x)$, $\log(x)$);
- функцію квадратного кореня (\sqrt{x}).

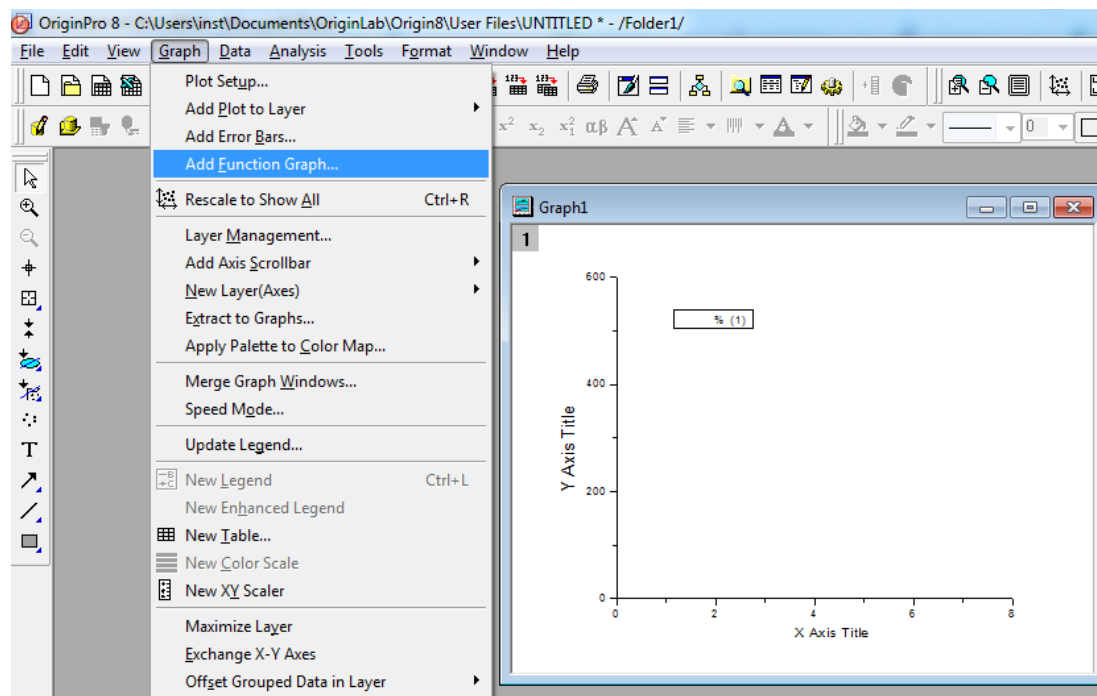


Рисунок 2.12 – Вибір опції побудови графіків функції **Add Function Graph....**

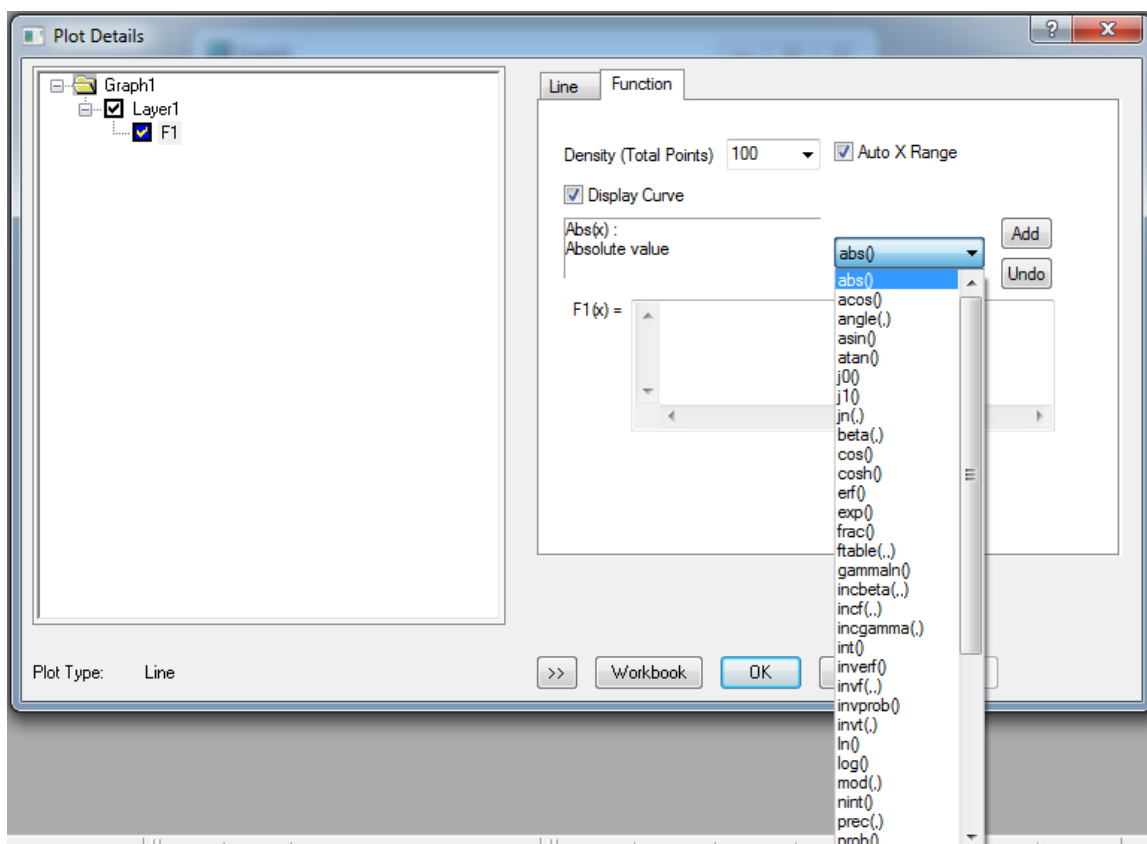


Рисунок 2.13 – Вибір опції функції побудови графіків за замовчуванням у підпункті **Function** діалогового вікна **Plot Details**.

Також можна вводити свою функцію до **F1(x)=** у підпункті **Function** діалогового вікна **Plot Details**. На Рис. 2.14 наведено приклад побудови такого графіку.

Побудова 2D графіків в полярній системі координат

Розглянемо на прикладі побудову 2D графіка в полярній системі координат. Побудуємо так звану «полярну троянду», яка являє собою плоску криву, що нагадує символічне зображення квітки. Ця крива описується рівнянням в полярній системі координат як: $\rho = a \cdot \sin(k\phi)$, де a – стала, що визначає розмір пелюсток троянди, а k – їх кількість.

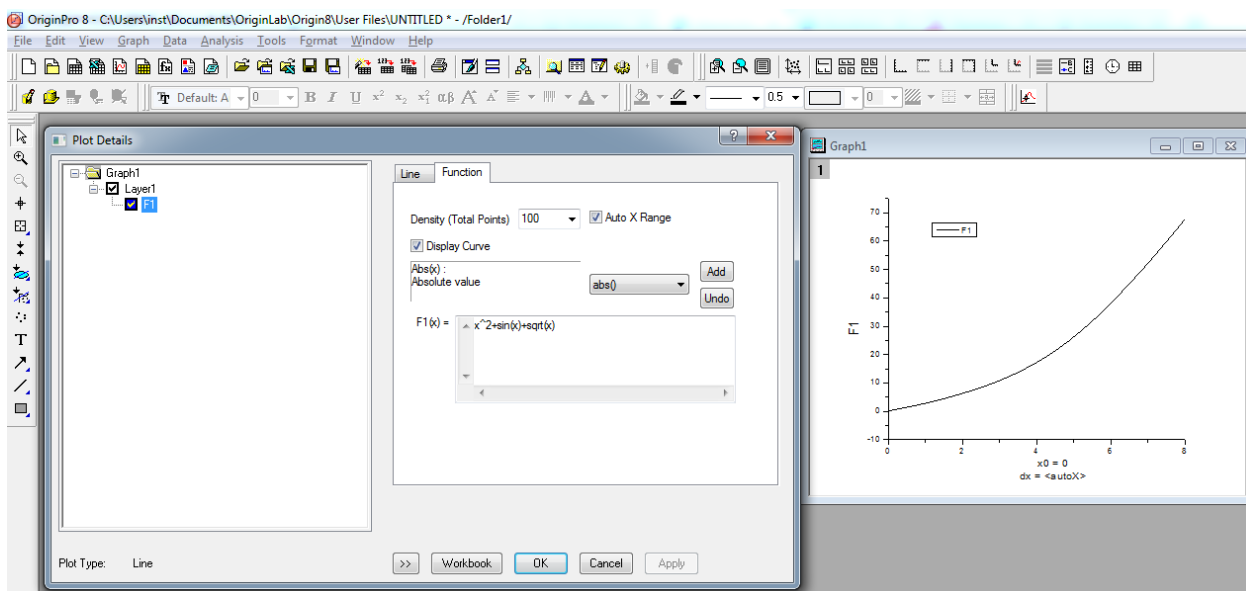


Рисунок 2.14 – Приклад побудови графіка функції у підпункті **Function** діалогового вікна **Plot Details**.

Нехай потрібно побудувати полярну троянду з наступними параметрами: $\varphi \in [0; 2\pi]$, $a = 1$, $\kappa = 12$. В програмному середовищі OriginPro графік у полярних координатах задається у градусах, тому спочатку у таблиці даних у стовпчику A(X) потрібно задати значення кута φ від 0 до 360. Для цього виділяємо стовпчик A(X) і за допомогою опції **Set Column Values...** з меню **Column** у вікні **Set Values** задамо: $\text{col(A)}=0+1*(i-1)$, де i – номер рядка значень A(X), який задається у **Row(i): From ... To...** (див. Рис. 2.15). Далі задаємо значення для ρ у стовпчику B(Y), для цього виділяємо стовпчик B(Y) і за допомогою опції **Set Column Values...** з меню **Column** у вікні **Set Values** задамо: $\text{col(B)}= 1*\sin(12*\text{radians}(\text{col(A)}))$, користуючись функцією **radians** для переводу значень кута φ у стовпчику A(X) з градусів у радіани (див. Рис. 2.16).

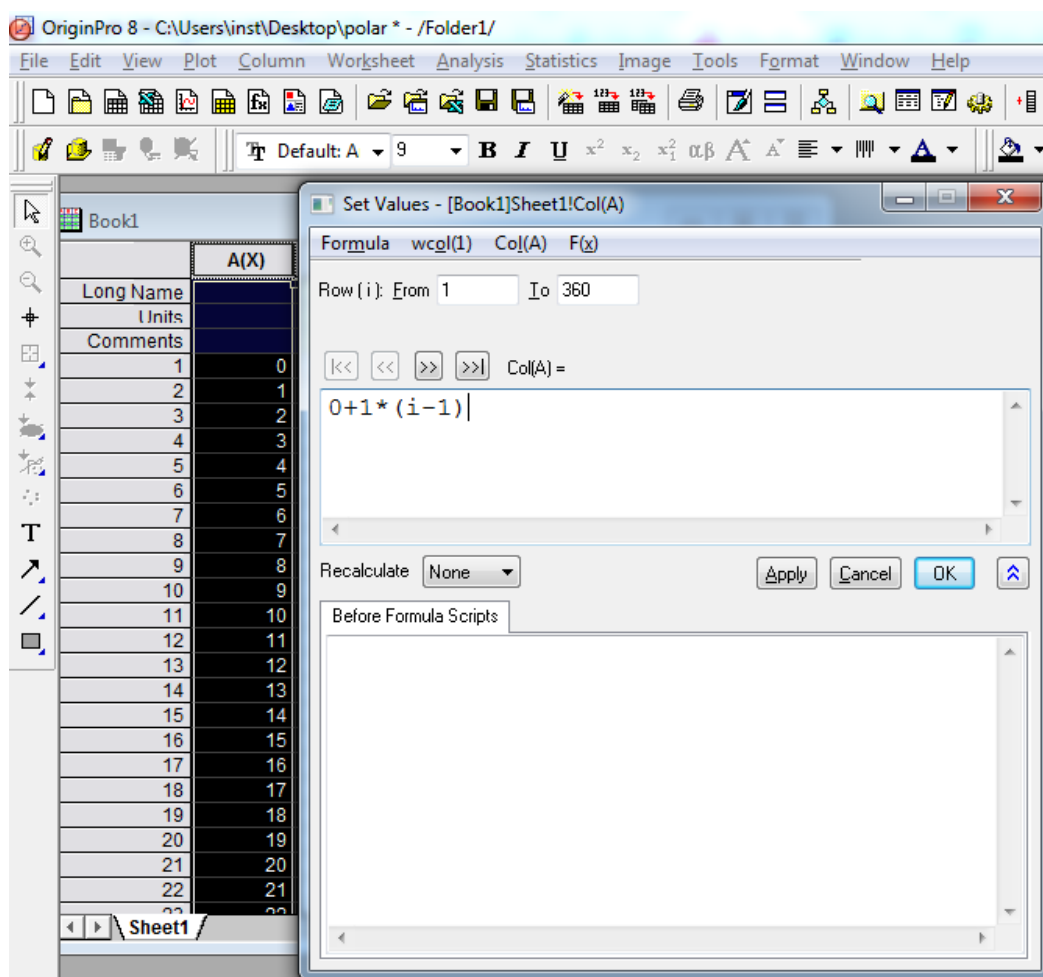


Рисунок 2.15 – Задавання значень стовпчика A(X) 0 до 360 у вікні **Set Values**.

Далі виділяємо стовпчики A(X) та B(Y) і у меню **Plot** обираємо **Specialized** та **Polar theta(X) r(Y)** (Рис. 2.17). У вікні, що відкриється буде зображено графік у полярних координатах (Рис. 2.18), для його коректного відображення потрібно у властивостях графіка вказати, що має відображатись вісь зі значенням не знизу (Bottom), а вісь зверху (Top) (вікно зміни властивостей осей детально наведено на Рис. 3.10).

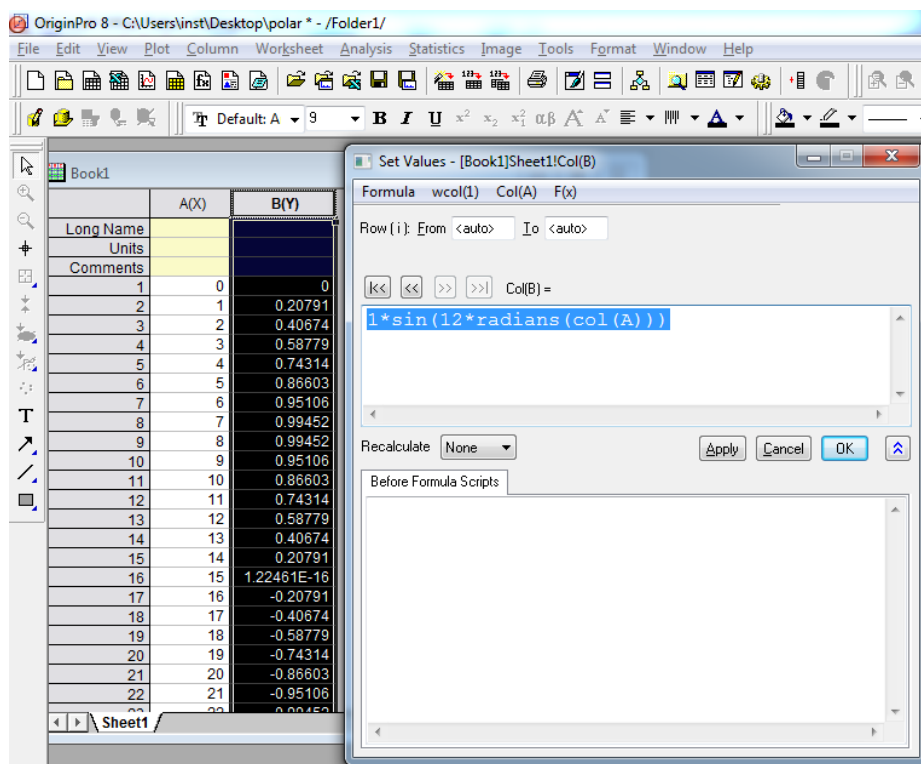


Рисунок 2.16 – Задавання значень стовпчика B(Y) для обчислення значень ρ у вікні Set Values.

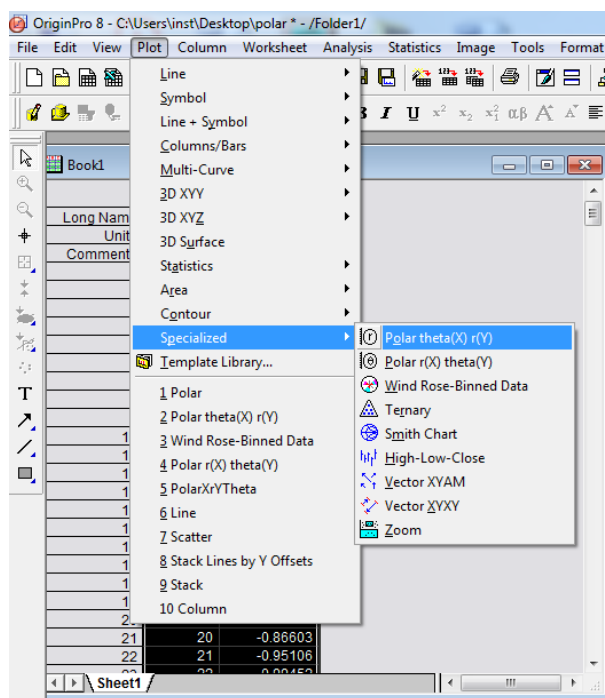


Рисунок 2.17 – Задавання значень стовпчика B(X) для обчислення ρ у вікні Set Values.

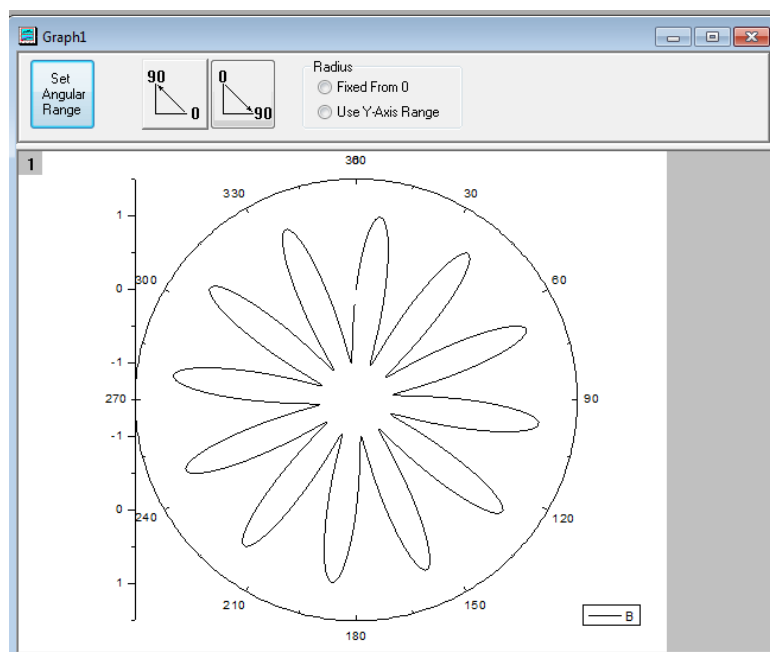


Рисунок 2.18 – Графік у полярних координатах із застосуванням опції **Polar theta(X) r(Y)**.

Експорт та збереження даних

З програмного середовища OriginPro можна експортувати дані у різних форматах.

Значення з таблиці даних можна експортувати у наступних форматах:

- ASCII (*.dat, *.txt, *.csv),
- National Instruments TDM Files (*.tdm, *.tdms),
- Wave File (*.wav).

Для виконання процедури експорту значень потрібно обрати потрібну таблицю даних **Book**. Далі у меню **File** обрати пункт **Export** і обрати потрібний формат файлу даних (Рис. 2.19).

Для експорту створених графіків у вікні **Graph**, потрібно зробити це вікно активним, далі в меню **File** обрати пункт **Export Graphs...** (Рис. 2.20).

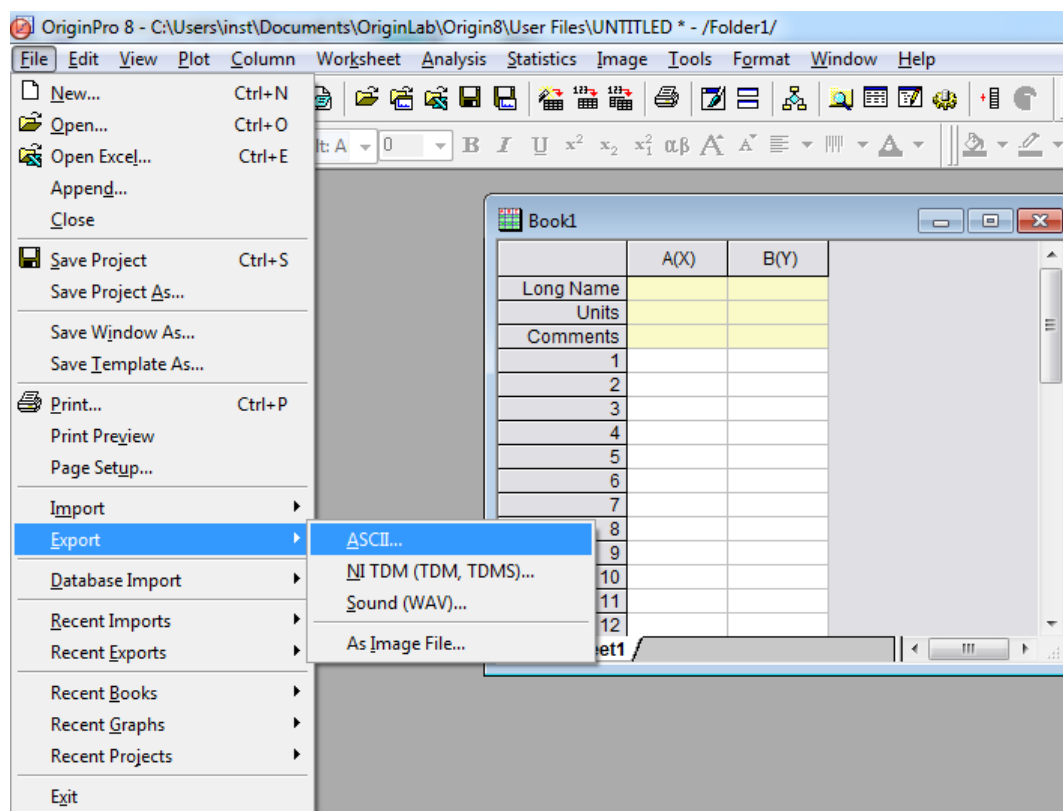


Рисунок 2.19 – Вибір опції експорту даних з таблиці даних.

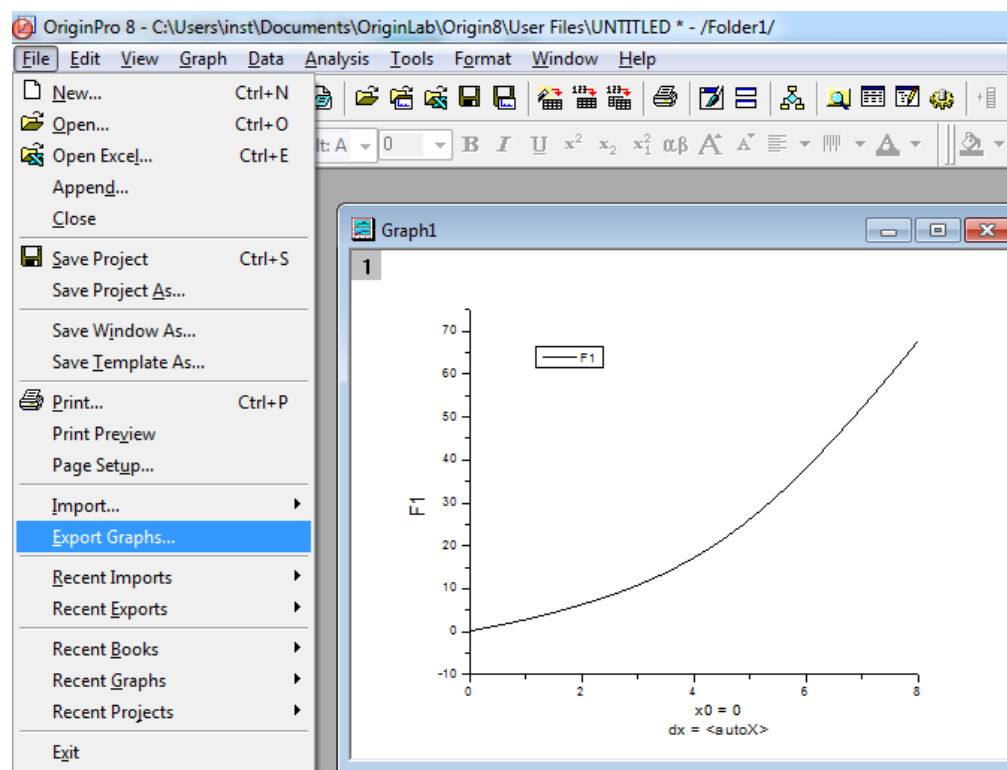


Рисунок 2.20 – Вибір опції експорту графічних даних **Export Graphs...**

Далі в діалоговому вікні **Import and Export: expGraph**, що з'явиться (Рис. 2.21), можна обрати потрібний формат для збереження графічних даних у найпоширеніших форматах (*.ai, *.bmp, *.cgm, *.dxf, *.emf, *.eps, *.gif, *.jpg, *.pcx, *.pdf, *.png, *.psd, *.tga, *.tif, *.wmf). Також можна задавати розмір зображень та їх роздільну здатність.

Для збереження створеного проекту з таблицями даних, графіками та іншими вікнами потрібно в меню **File** обрати пункт **Save Project As...** (Рис. 2.22). Створений проект буде збережено як файл з розширенням orj, що є стандартним розширенням для програмного середовища OriginPro.

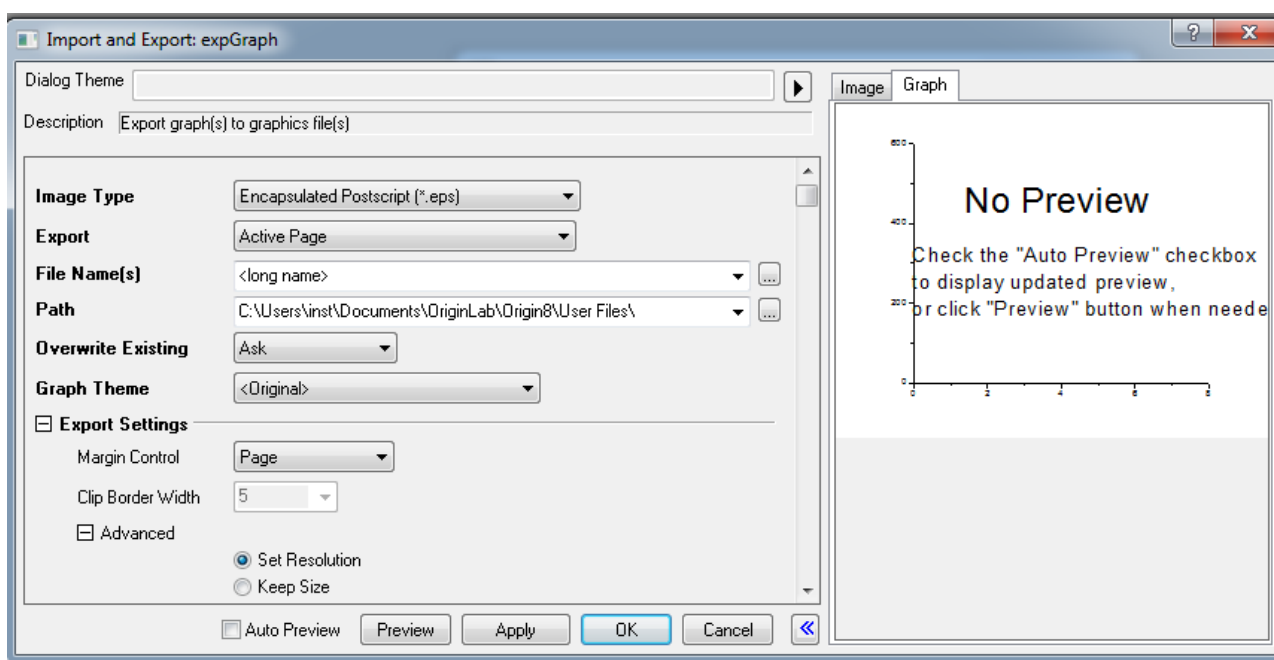


Рисунок 2.21 –Діалогове вікно **Import and Export: expGraph** для експорту графічних даних.

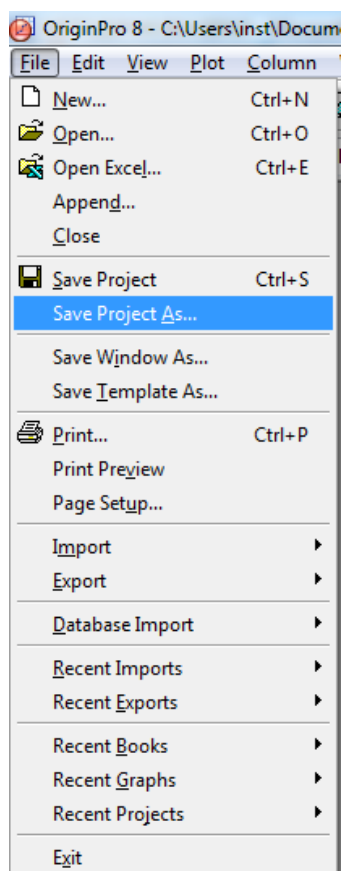


Рисунок 2.20 – Вибір опції збереження створеного проекту у програмному середовищі OriginPro **Save Project As...**

Оформлення графіків.

Мета роботи: засвоєння основ оформлення графіків.

Завдання роботи:

- навчитися представляти декілька ліній на одному графіку;
- навчитися створювати та редагувати різні шари на одному графіку;
- редагувати формат значень на осях графіків;
- редагувати легенди значень на графіках;
- редагувати стиль оформлення даних на графіках;
- додавати текст, малюнки на графіки.

Теоретичні відомості

Відображення результатів дослідження на графіках для звіту, доповіді чи наукової публікації є одним з найважливіших елементів роботи сучасних вчених та інженерів. Серед багатьох способів представлення результатів найбільш інформативним є саме графічне представлення. Графічне відображення даних, представлене в простій та зрозумілій формі, дуже часто відіграє ключову роль для прийняття рішень у різних сферах діяльності. За думкою авторів книги «*Beautiful Visualization*» (2013, O'Reilly Media) Джулі Стіл та Ноя Ільїнські Можна виокремити чотири ключових фактори, які характеризують вдалу візуалізацію:

✓ *Новизна.* Вдала візуалізація має бути не лише ефективною, але й пропонувати свіжий погляд на речі, виводити результати аналізу даних на новий рівень розуміння.

✓ *Інформативність.* Одна з основних цілей візуалізації – це донести до користувача необхідну інформацію, саме це є запорукою прийняття вірних рішень.

✓ *Простота.* Візуалізація не має бути перевантажена зайвою інформацією, доступ до тих чи інших показників має відбуватись простим та найкоротшим шляхом.

✓ *Естетика.* Шари, лінії, форми та кольори відграють неабияку роль у сприйнятті візуальної інформації.

Представлення декількох ліній на одному графіку

В програмному середовищі OriginPro можна будувати одночасно декілька ліній на одному графіку.

Одним з варіантів такого графіку може бути випадок коли для одних і тих же даних у стовпчику зі значенням по вісі X маємо різні стовпчики зі значенням по вісі Y. Для побудови такого графіка треба виділити все необхідні стовпчики та обрати в меню **Plot** у підпункті **Line** й обрати **Line** (Рис. 2.1). На Рис. 3.1 показано приклад представлення декількох ліній на одному графіку коли для різних значень Y маємо однакові значення X.

У випадку коли на одному графіку потрібно представити незалежні дані потрібно створювати декілька таблиць даних.

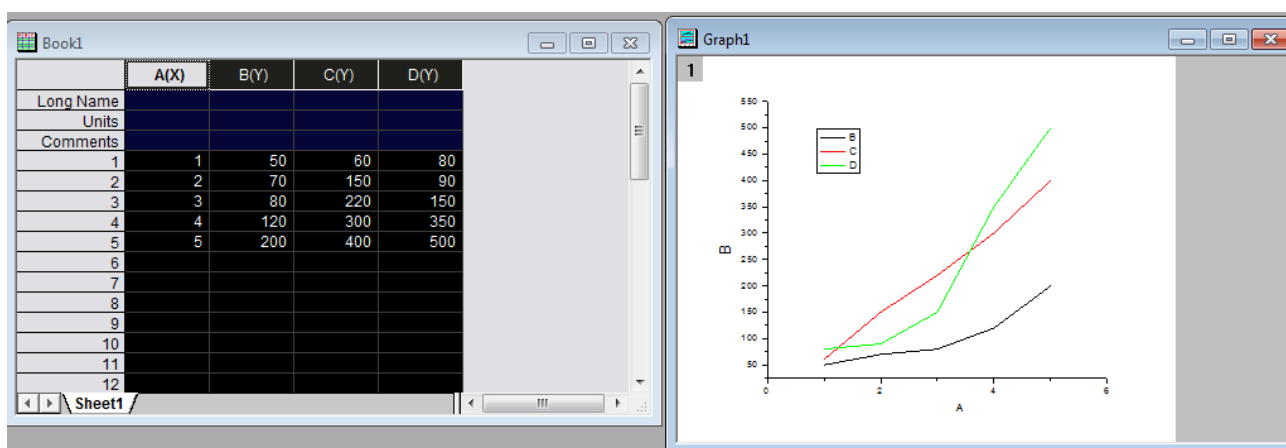


Рисунок 3.1 – Приклад представлення декількох ліній на одному графіку у випадку коли для різних значень Y маємо однакові значення X.

Наведемо приклад оформлення графіку, на якому представлені дані з двох різних таблиць даних. Для цього треба створити ці дві таблиці даних, ввести в них потрібні значення. Далі будуємо графік, використовуючи дані з першої таблиці, як було показано на Рис. 2.2. Потім треба виділити значення у другій таблиці даних, зробити активним вікно графіка, куди потрібно додати лінію й обрати в меню **Graph** в пункті **Add Plot to Layer...** підпункт **Line** (Рис. 3.2). На Рис. 3.3 наведено приклад графіка, на якому представлено значення з двох різних таблиць даних.

Створення декількох шарів на одному графіку

В програмному середовищі OriginPro існує можливість на одному графіку, застосовуючи декілька шарів, представляти дані в різних системах координат. Наведемо приклад оформлення графіку, на якому представлені дані з двох різних таблиць даних в різних системах координат. Для цього треба створити ці дві таблиці даних, ввести в них потрібні значення. Далі будуємо графік, використовуючи дані з першої таблиці, як було показано на Рис. 2.2.

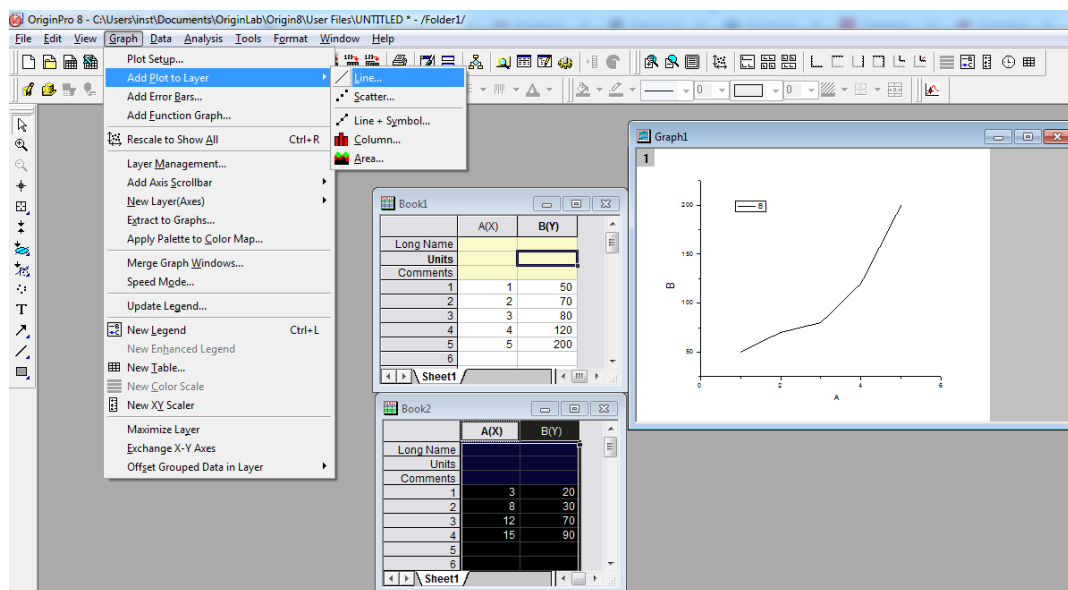


Рисунок 3.2 – Опція додавання даних з другої таблиці даних до вже існуючого графіка **Add Plot to Layer...**

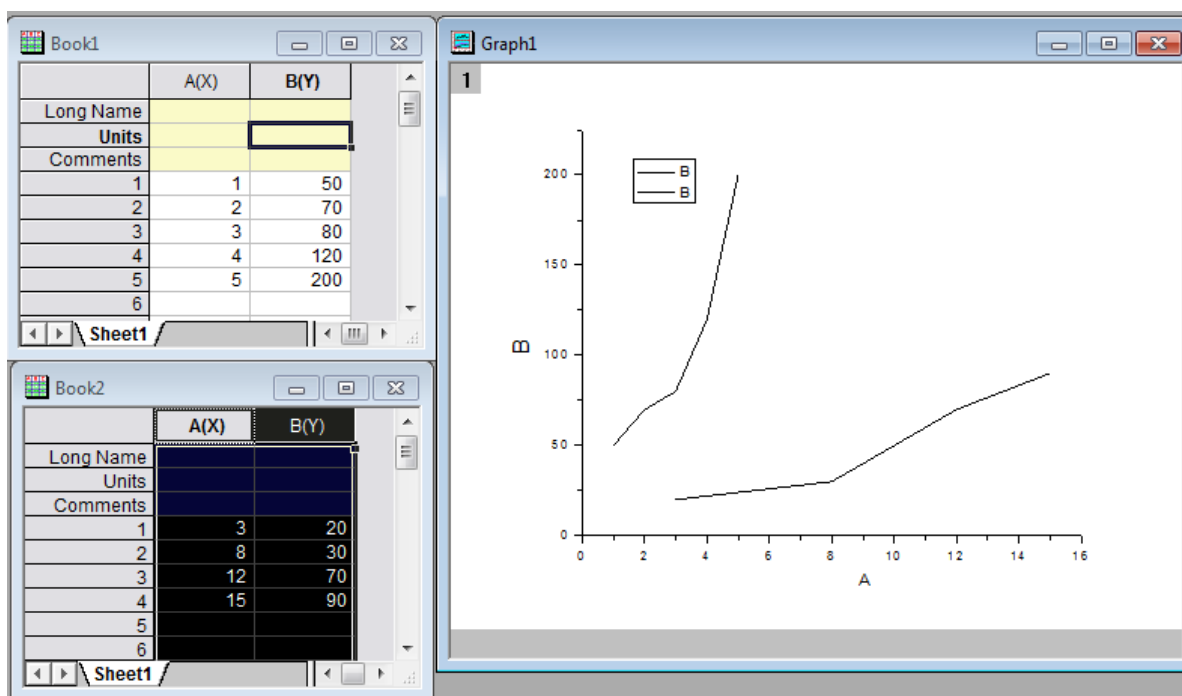


Рисунок 3.3 – Приклад графіка, на якому представлено значення з двох різних таблиць даних.

Потім треба зробити активним вікно графіка, обрати в меню **Graph** підпункт **New Layer(Axes)** та обрати необхідний формат системи координат для нового шару (**Layer**) на графіку (Рис. 3.4):

- **Bottom X - Left Y** (новий шар матиме X вісь внизу, а Y вісь буде зліва збоку);
- **Top-X (Linked Y Scale and Dimension)** (новий шар матиме X вісь зверху, а Y вісь буде пов'язана з Y віссю вже існуючого графіку);
- **Right-Y (Linked X Scale and Dimension)** (новий шар матиме Y вісь збоку справа, а X вісь буде пов'язана з X віссю вже існуючого графіку);
- **Left-Y (Linked X Scale and Dimension)** (новий шар матиме Y вісь збоку зліва, а X вісь буде пов'язана з X віссю вже існуючого графіку);
- **Top-X Right-Y (Linked Dimension)** (новий шар матиме X вісь зверху, а Y вісь буде збоку справа);

- **Bottom-X Right-Y (Linked Dimension)** (новий шар матиме X вісь знизу, а Y вісь буде збоку справа);
- **Inset (Linked Dimension)** (новий шар з'явиться у якості вставки на графіку);
- **Inset With Data (Linked Dimension)** (новий шар з'явиться у якості вставки на графіку, з даними, які представлені на основному графіку);
- **No Axes (Linked XY Scale and Dimension)** (новий шар з'явиться без осей координат)
- **Open Dialog...** (відкриється діалогове вікно для налаштування розширених параметрів нового шару).

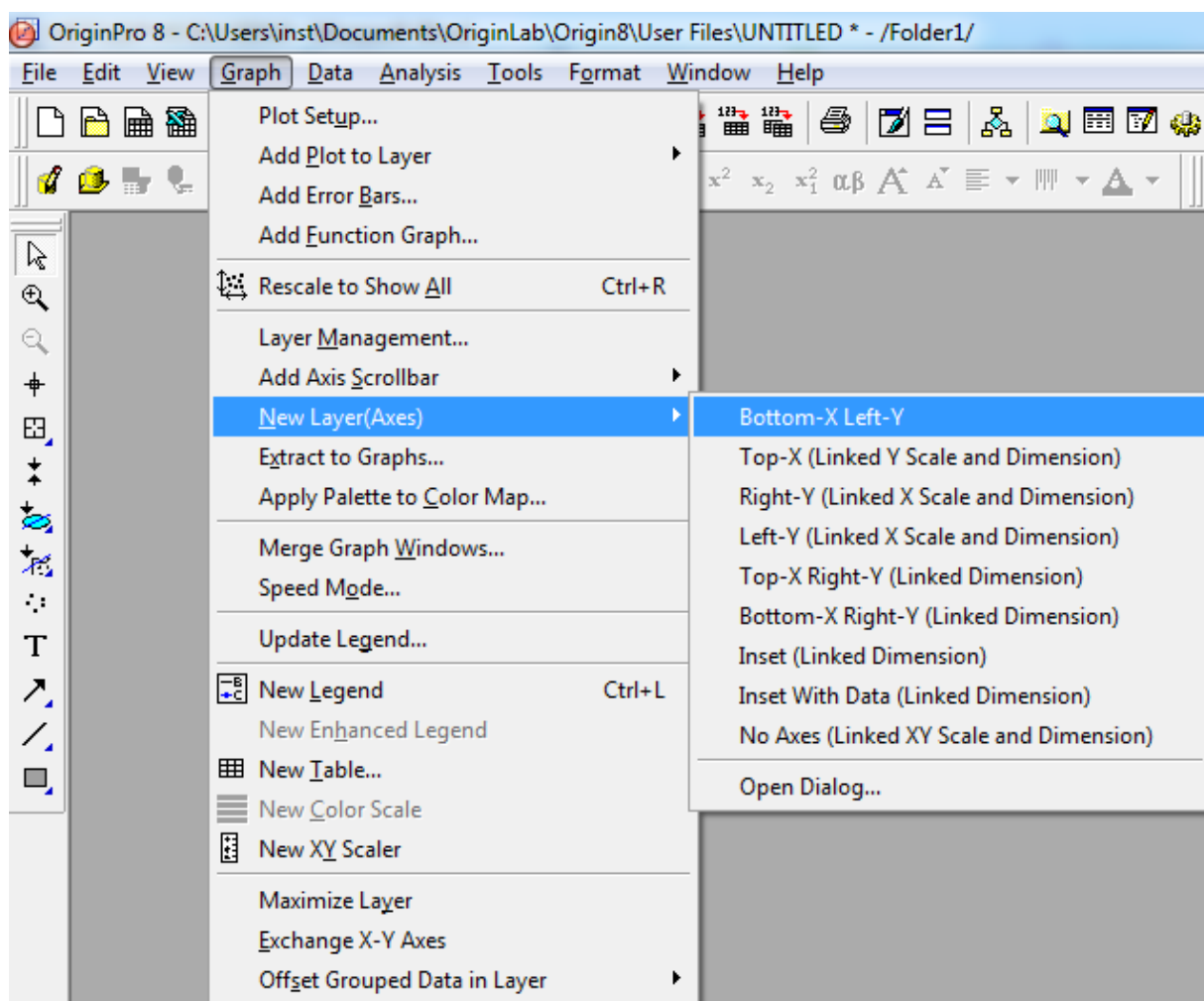


Рисунок 3.4 – Опція додавання нового шару до вже існуючого графіка.

На Рис. 3.5 зображено приклад додавання нового шару, використовуючи опцію **Bottom X - Left Y**, до вже існуючого графіку. На Рис. 3.5 стрілочками показано, що з'явився номер нового шару (2) та нові координати. Для додавання лінії на графік у шарі (2) потрібно зробити його активним, потім обрати в меню **Graph** у пункті **Add Plot to Layer** підпункт **Line**. Далі з'явиться діалогове вікно **Plot Setup: Configure Data Plots in Layer** (Рис. 3.6).

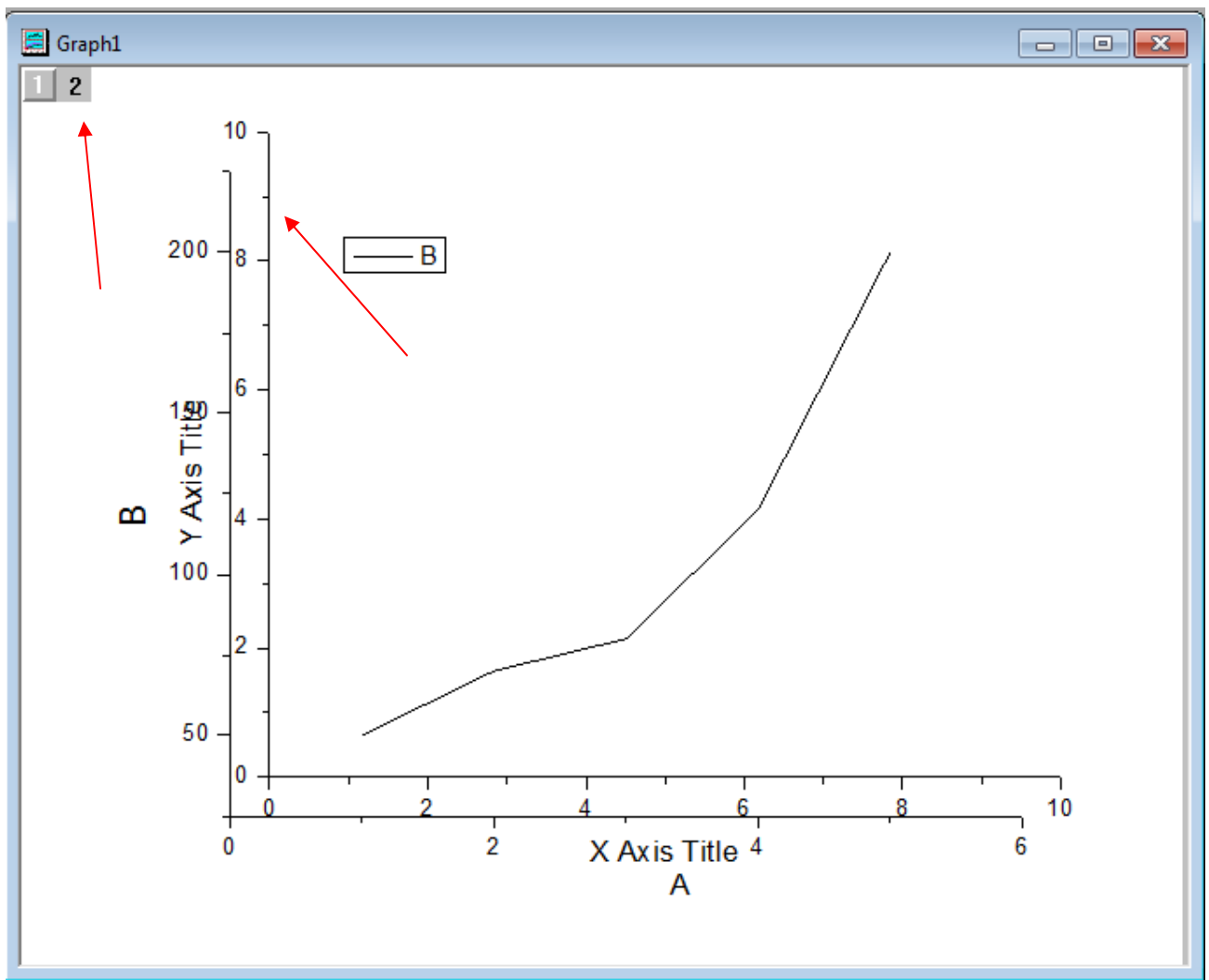


Рисунок 3.5 – Приклад додавання нового шару (2, позначено червоними стрілочками), використовуючи опцію **Bottom X - Left Y**, до вже існуючого графіку.

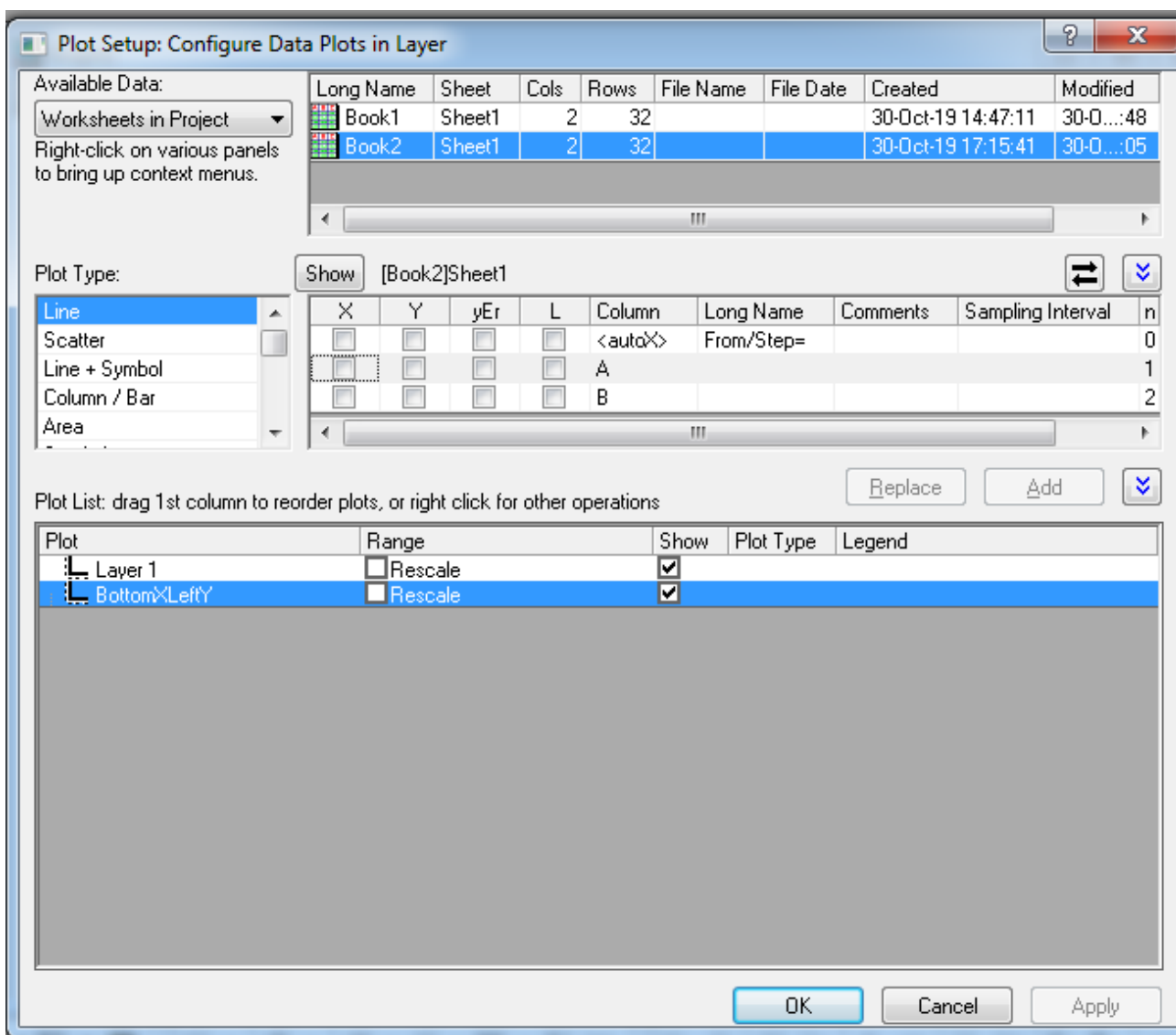


Рисунок 3.6 – Діалогове вікно **Plot Setup: Configure Data Plots in Layer**.

У діалоговому вікні **Plot Setup: Configure Data Plots in Layer** треба обрати необхідну таблицю даних для побудови графіка, вказати тип графіка (лінія, графік по точках, тощо) обрати які стовпчики у таблиці даних будуть розглядатись як значення по вісі X та Y та обрати відповідний шар. Далі натиснути на **Add** та **OK**. На Рис. 3.7 наведено приклад побудови графіка Graph1 з двома шарами **1** **2**, причому шар 1 побудовано за таблицею даних Book1, а шар 2 – за таблицею даних Book2.

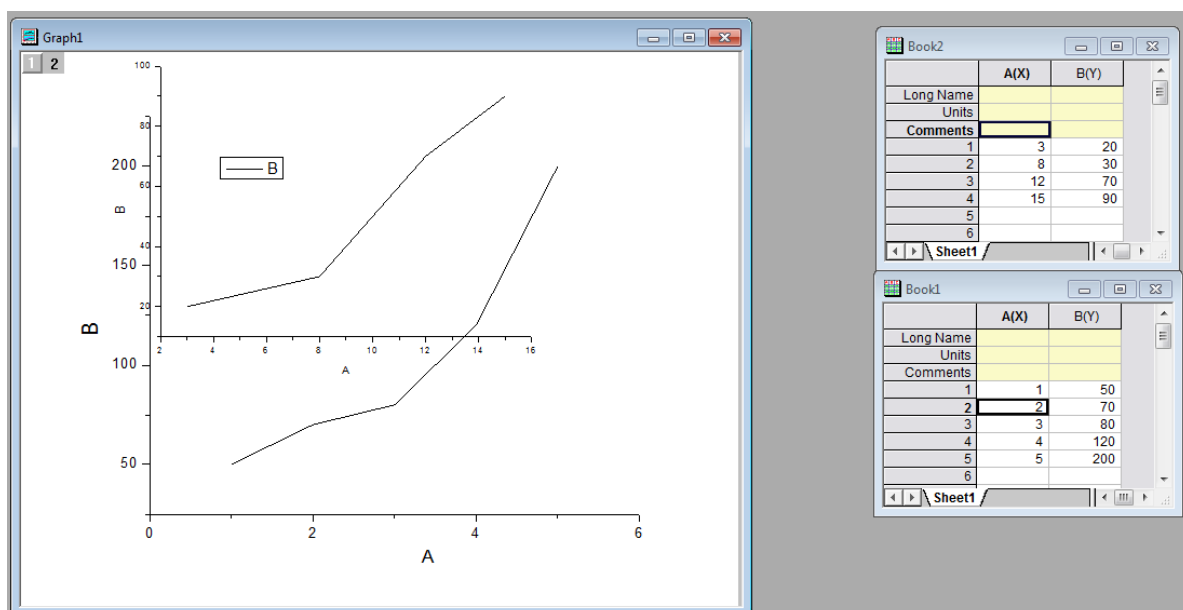


Рисунок 3.7 – Приклад побудови двох шарів на одному графіку.

Шари можна переміщувати по графіку, а також змінювати їх розмір, попередньо зробивши шар активним та кликнувши лівою кнопкою мишки на робочу область шару (Рис. 3.8).

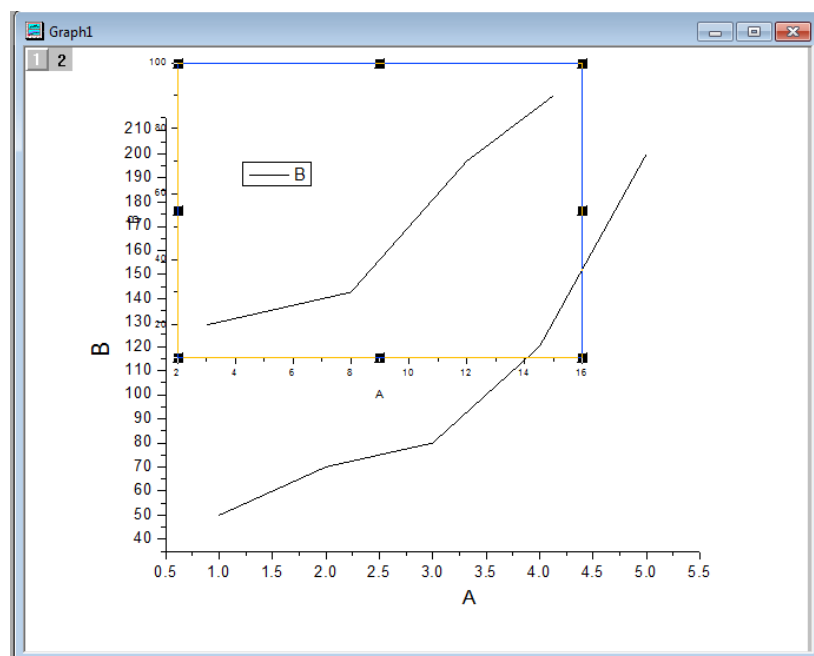


Рисунок 3.8 – Приклад виділення графіку на шарі 2 для його подальшого переміщення або зміни його розмірів.

Редагування властивостей осей графіка

Для редагування властивостей осей графіка потрібно двічі кликнути мишкою на вільну область графіку на потрібному шарі і обрати **Axis...** або ж на одну з осей графіка чи на числові значення осей координат. В результаті з'явиться діалогове вікно для редагування властивостей осей координат графіку на даному шарі. На Рис. 3.9 показано діалогове вікно редагування властивостей осей координат графіку на шарі 1 (Layer 1). Воно має 8 різних вкладок.

Перша вкладка **Scale** дозволяє редагувати діапазон значень від мінімального (**From**) до максимального (**To**), представлених на горизонтальній (**Horizontal**) та вертикальній (**Vertical**) осях координат (вибір вісі у **Selection**). Можна задати мінімальний шаг основних значень (**Increment**) або вказати кількість значень для відображення на вісі (**#Major Ticks**), також можна задати кількість проміжних позначок між основними значеннями (**#Minor Ticks**).

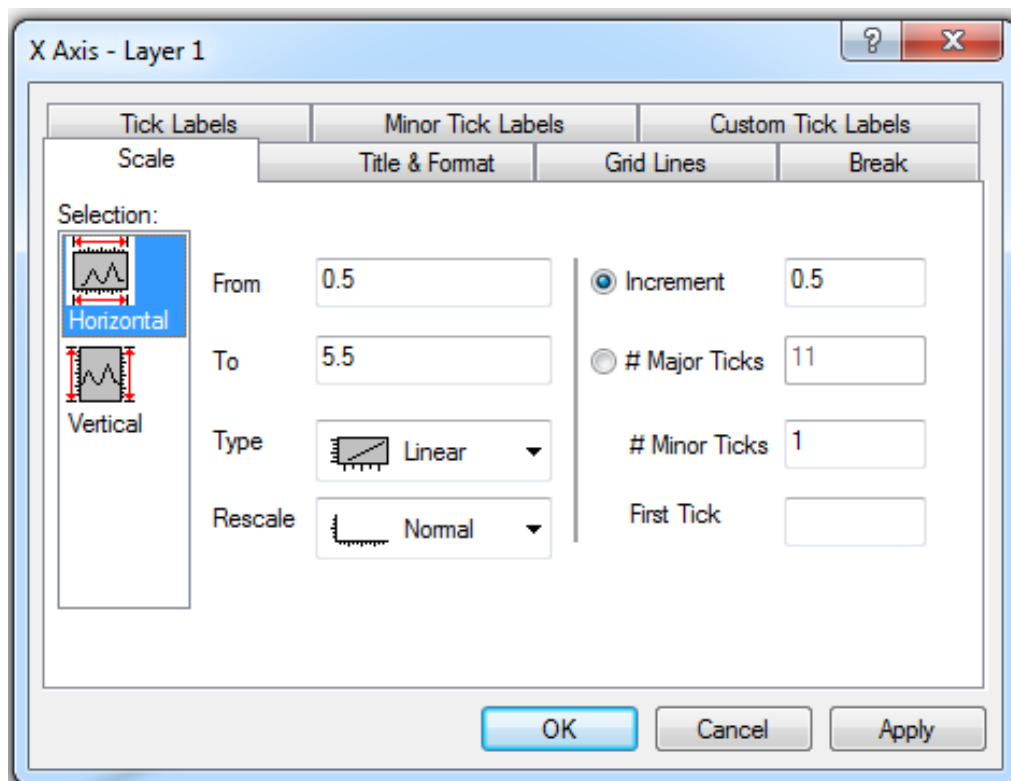
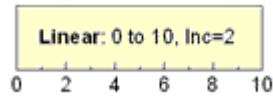


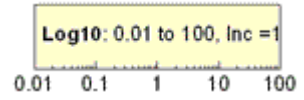
Рисунок 3.9 – Діалогове вікно редагування властивостей осей координат графіку на шарі, вкладка **Scale**.

У полі **Type** є можливість задати тип шкали вісі, зокрема:

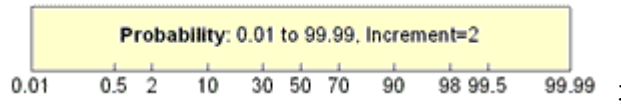
- **Linear** – стандартна лінійна шкала: $X'=X$



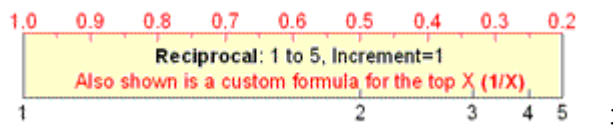
- **Log10** – базова логарифмічна шкала: $X'=\log(X)$



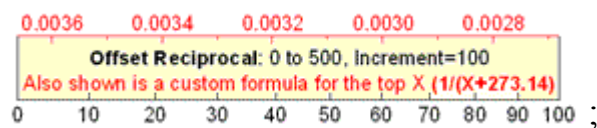
- **Probability** – представляє обернений розподіл Гауса: $X'=\text{norminv}(X/100)$.



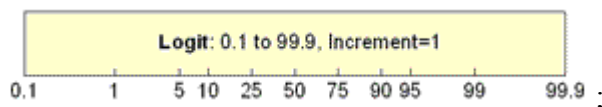
- **Reciprocal** – обернена шкала: $X'=1/X$



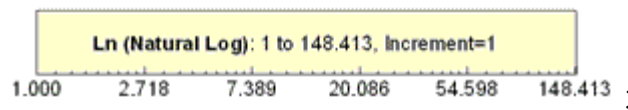
- **Offset Reciprocal** – обернена шкала зі зсувом: $X'=1/(X+\text{offset})$. Offset визначається як 273.14, де 273.14 це абсолютна температура для 0°C



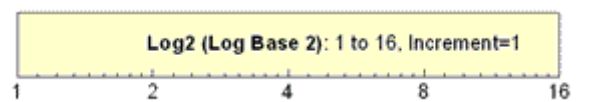
- **Logit** – шкала у вигляді: $\text{Logit}=\ln(Y/(100-Y))$



- **ln** – шкала натурального логарифма



- **log2** – шкала логарифма за основою 2



Розглянемо наступну вкладку **Title & Format** діалогового вікна редагування властивостей осей координат графіку на шарі (Рис. 3.10).

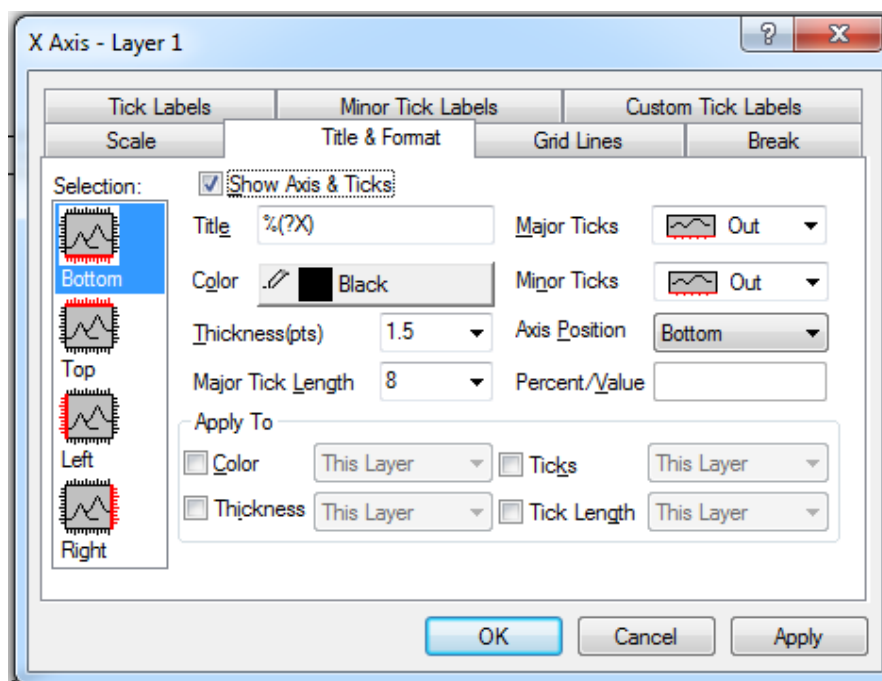


Рисунок 3.10 – Діалогове вікно редагування властивостей осей координат графіку на шарі, вкладка **Title & Format**.

Опції у вкладці **Title & Format** дозволяють вмикати/вимикати відображення осей на графіку. Для відображення відповідної вісі потрібно обрати **Show Axis & Ticks**, попередньо обравши потрібну вісь в меню **Selection**. За замовчуванням відображаються лише нижня та верхня вісь на графіку. Після обрання опції відображення вісі стають доступним інші інструменти:

- **Title** – підпис заголовку вісі;
- **Color** – колір вісі;
- **Thickness(pts)** – товщина вісі;
- **Major Tick Length** – довжина основних міток на вісі;
- **Major Ticks** – положення основних міток на вісі (**In&Out** – всередині та ззовні, **In** – всередині, **Out** – ззовні, **None** – без відображення міток);
- **Minor Ticks** – положення проміжних міток на вісі (**In&Out** – всередині та ззовні, **In** – всередині, **Out** – ззовні, **None** – без відображення міток);
- **Axis position** – розташування вісі.

На нижній частині вкладки є опція **Apply to**, яка дозволяє розповсюдити обрану схему відображення елементів графіка на окремий шар на даному графіку (**This Layer**), на всі шари (**This Window**) або на всі графіки, відкриті у даному проекті (**All Windows**).

Наступною вкладкою діалогового вікна редагування властивостей осей координат графіку на шарі є **Grid Lines** (Рис. 3.11). За допомогою цієї вкладки можна додавати на графік лінії сітки для основних (**Major Grids**) та проміжних (**Minor Grids**) позначок на вертикальних (**Vertical**) та горизонтальних (**Horizontal**) осях. Для цього треба обрати ці опції у діалоговому вікні. Також можна редагувати колір (**Line Color**), тип (**Line Type**) та товщину (**Thickness(pts)**) ліній сітки. За потребою можна включити до графіка і додаткові лінії (**Additional Lines**), наприклад, лінії $X=0$ та $Y=0$.

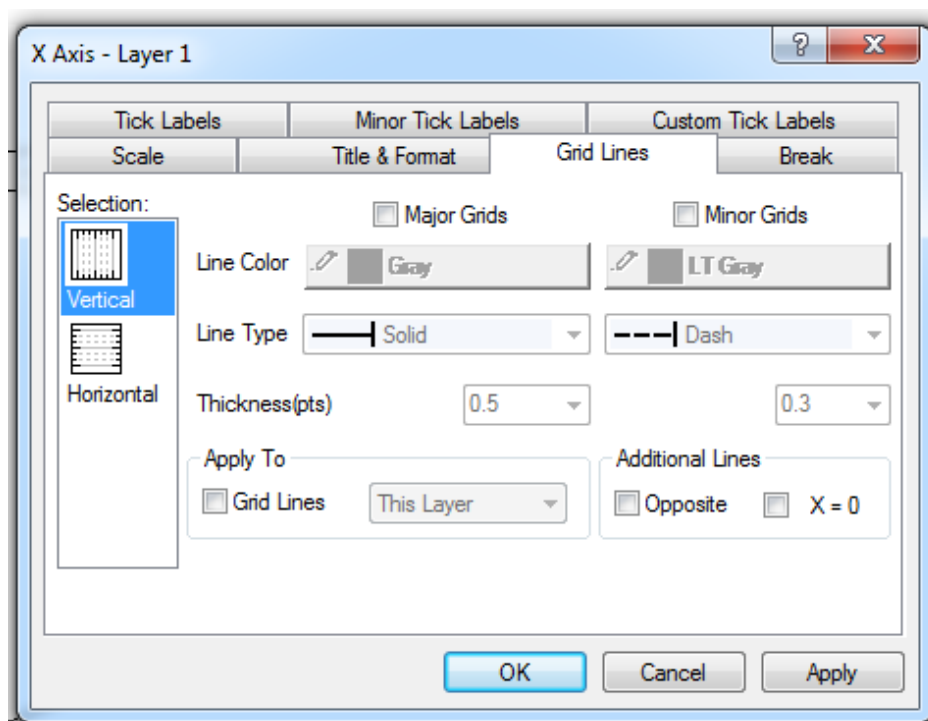


Рисунок 3.11 – Діалогове вікно редагування властивостей осей координат графіку на шарі, вкладка **Grid Lines**.

Розглянемо наступну вкладку діалогового вікна редагування властивостей осей координат графіку на шарі – **Break** (Рис. 3.12). Ця вкладка дозволяє увімкнути режим відображення розриву на горизонтальній (**Horizontal**) та вертикальній (**Vertical**) осях шляхом вибору опції **Show Break**. Далі можна вказати діапазон розриву (**From, To**), положення розриву на вісі у процентах від загальної довжини вісі (**Break Position > % of Axis Length**), шаг для позначок на вісі до (**Scale Increment > Before Break**) та після (**Scale Increment > After Break**) розриву та кількість проміжних позначок до (**Minor Ticks > Before Break**) та після (**Minor Ticks > After Break**) розриву. Ця опція є корисною у випадку, коли потрібно виключити деякий діапазон даних з відображення на графіку, не видаляючи їх з таблиці даних.

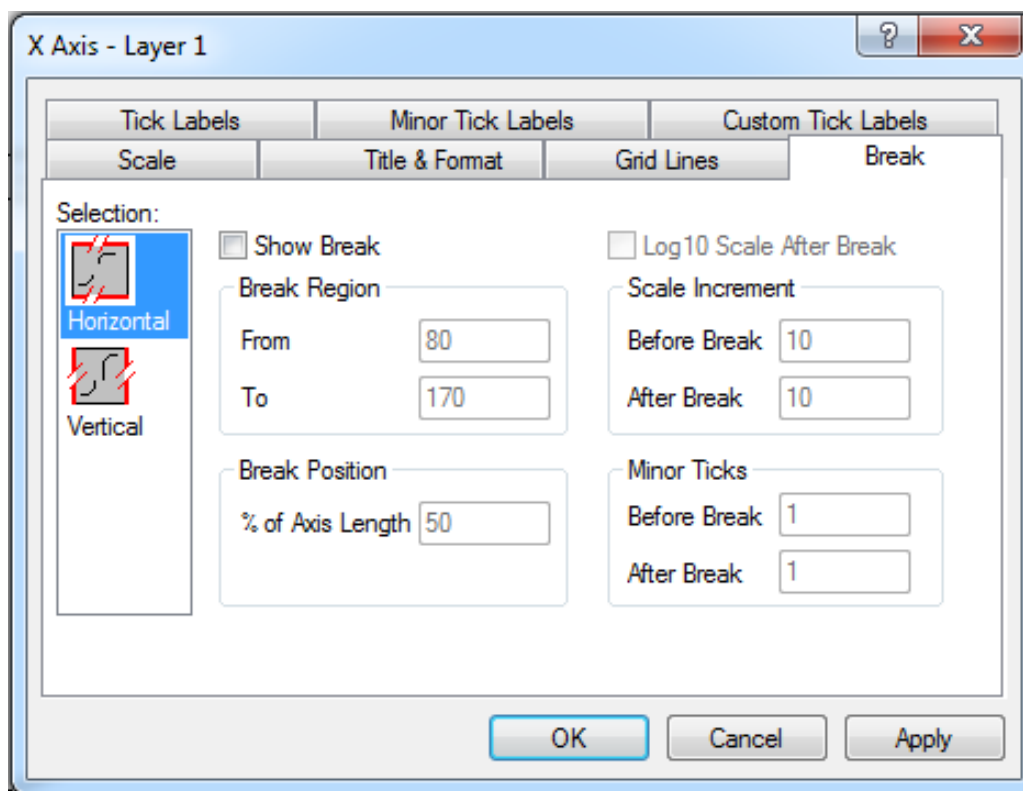


Рисунок 3.12 – Діалогове вікно редагування властивостей осей координат графіку на шарі, вкладка **Break**.

Наступна вкладка діалогового вікна редагування властивостей осей координат графіку на шарі це **Tick Labels** (Рис. 3.13). За допомогою цієї вкладки можна обрати чи будуть відображатись основні значення на осях (**Show Major Labels**) знизу (**Bottom**), зверху (**Top**), зліва (**Left**) та справа (**Right**). Далі можна обрати тип значень (**Type**), формат їх зображення (**Display**), за необхідності поділити їх значення на сталу величину (**Divide by Factor**), вказати шрифт (**Font**), колір (**Color**), розмір (**Point**). Число або символ, введені у поля **Prefix** та **Suffix**, будуть відображатися відповідно до та після підписів до значень на вісі.

Вкладка діалогового вікна редагування властивостей осей координат графіку на шарі **Minor Tick Labels** в свою чергу дозволяє налаштувати відображення проміжних значень на осях. Остання вкладка **Custom Tick Labels** дозволяє більш детально налаштувати властивостей осей координат графіку.

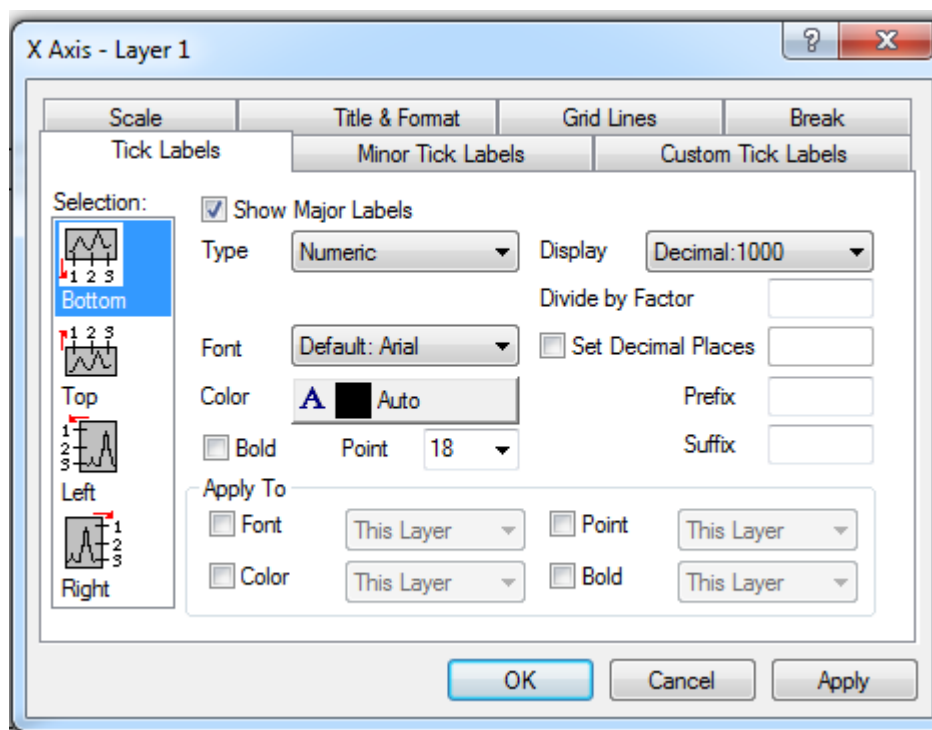


Рисунок 3.13 – Діалогове вікно редагування властивостей осей координат графіку на шарі, вкладка **Tick Labels**.

Редагування стилю графіка

Для редагування стилю оформлення графіка потрібно зробити його активним, а потім у меню **Format** обрати за потребою опцію форматування всієї сторінки (**Page...**), шару (**Layer...**) або графіка (**Plot...**) (Рис. 3.14).

На Рис. 3.15 показана вкладка форматування сторінки **Graph1** діалогового вікна **Plot Details**. Вкладка **Print/Dimensions** дозволяє налаштувати розмір сторінки та задавати параметри для друку графіка. Вкладка **Miscellaneous** дозволяє налаштувати режим відображення графіка, вкладка **Display** дозволяє налаштувати стиль оформлення фону графіка. Остання вкладка **Legends/Titles** контролює автоматичне зображення легенд та позначень осей на графіку.

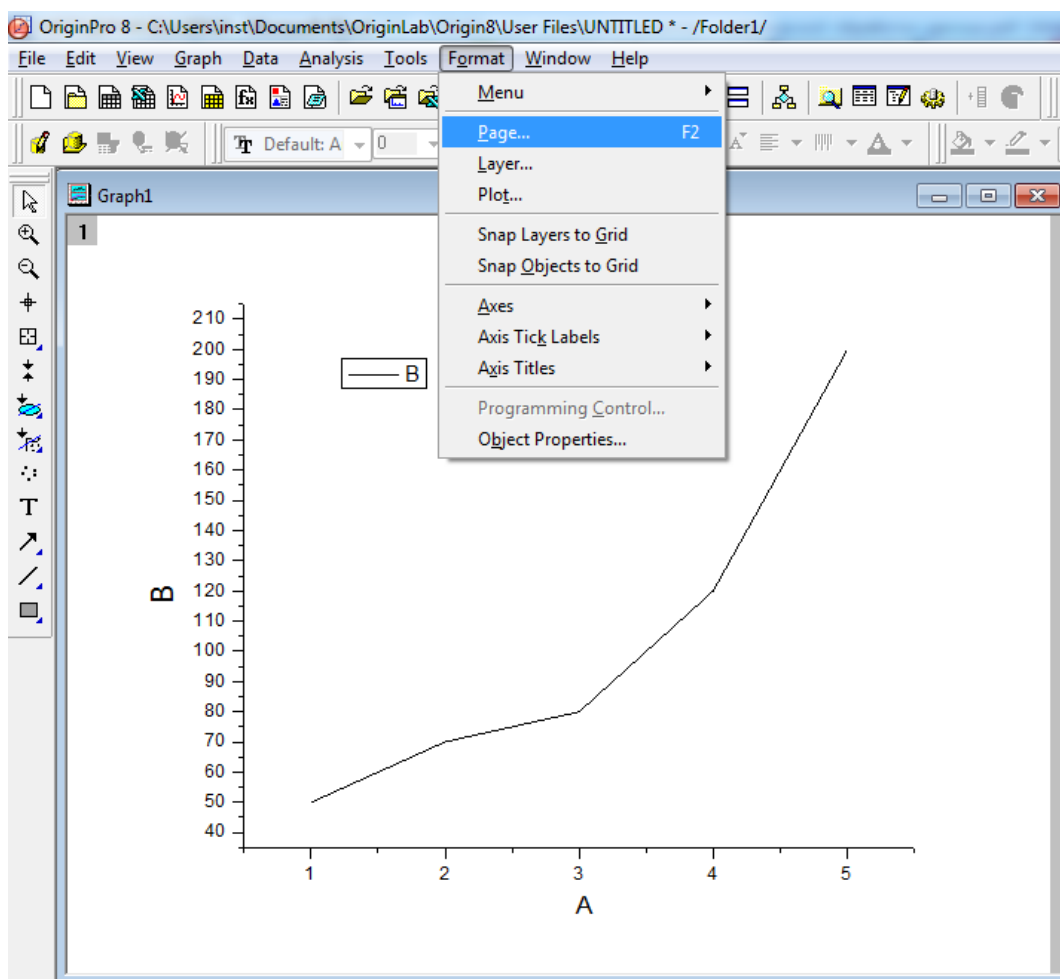


Рисунок 3.14 – Вибір опції форматування графіку у меню **Format**.

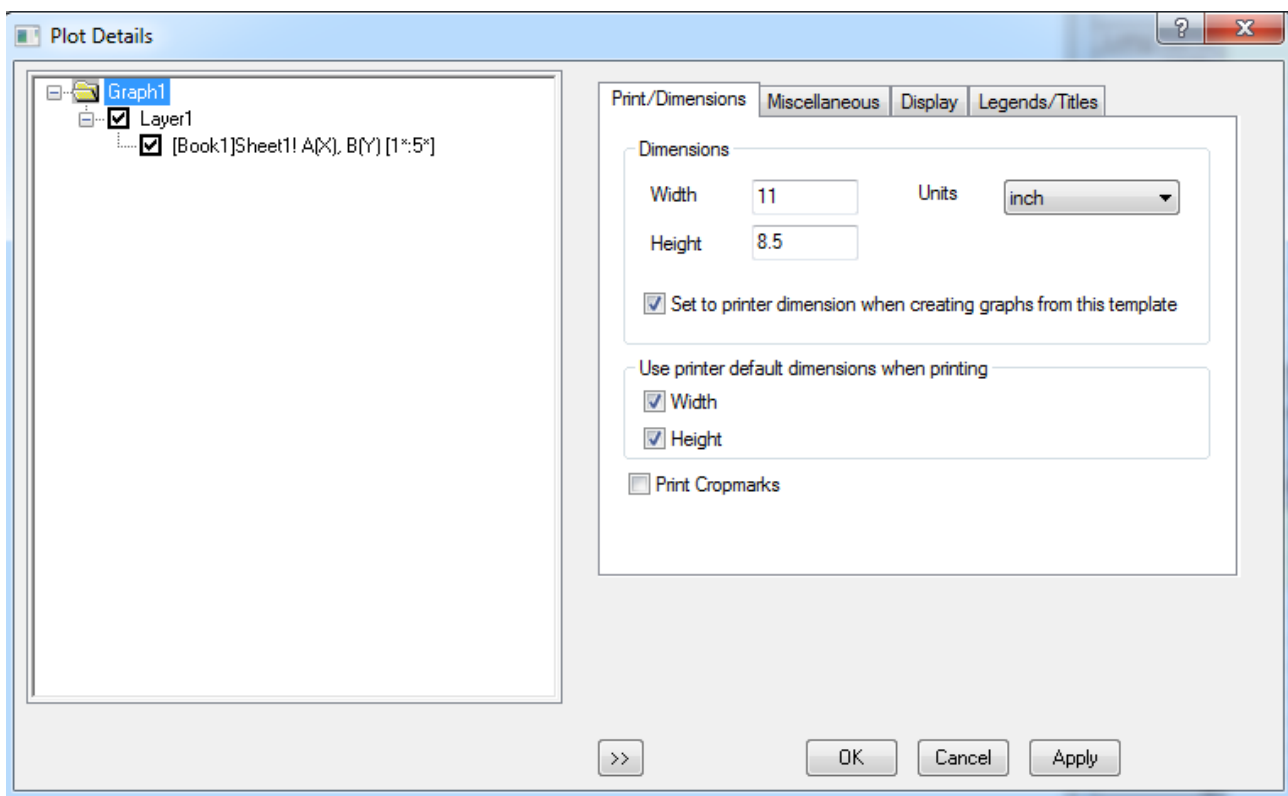


Рисунок 3.15 – Вкладка форматування сторінки **Graph1** діалогового вікна **Plot Details**.

Розглянемо вкладку форматування шару **Layer1** діалогового вікна **Plot Details** (Рис. 3.16). Перша вкладка **Background** дозволяє контролювати стиль оформлення фону шару. Друга вкладка **Size/Speed** дозволяє налаштувати розмір шару та режим відображення *Speed Mode* (опція покращення швидкості перемальовування даних на графіку). Наступна вкладка **Display** дозволяє налаштувати стиль оформлення шару. Остання вкладка **Stack** контролює зсув даних при режимі використання групованих графіків даних.

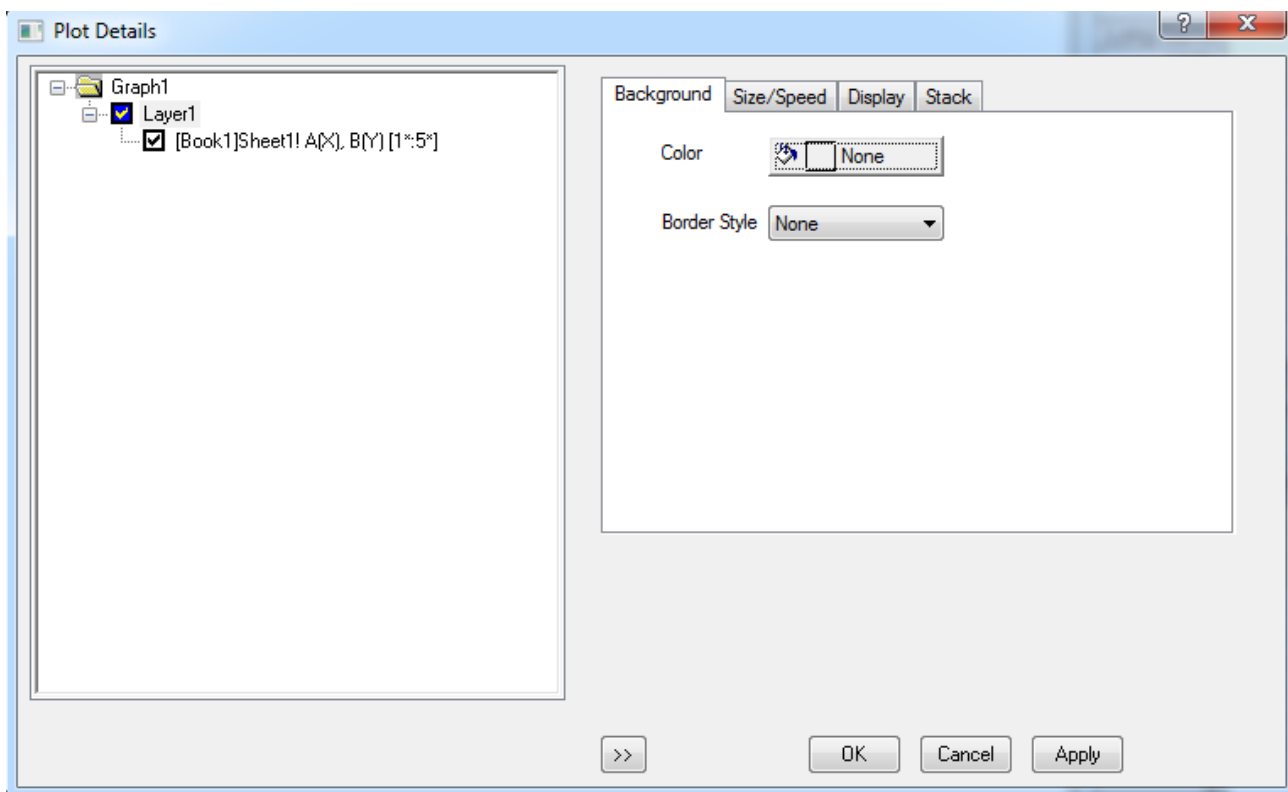


Рисунок 3.16 – Вкладка форматування шару **Layer1** діалогового вікна **Plot Details**.

Наступна вкладка діалогового вікна **Plot Details** стосується безпосередньо форматування відображення даних на графіку. В нашому випадку вона має назву **[Book1]Sheet1!A(X),B(Y)[1*.5*]** (Рис. 3.17), що означає, що це дані з таблиці даних Book1, розташовані на листі Sheet1, взяті з стовпчиків A(X) та B(Y). На Рис. 3.17 обрано опцію побудови лінії за значеннями за таблиці даних: **Plot Type > Line**. У цьому режимі можна налаштовувати характер з'єднання лінією точок на графіку **Connect**, основними з яких є:

- **No Line** – дані не будуть з'єднані лінією;
- **Straight** – точки будуть з'єднані лінією;
- **B-Spline** – для набору пар даних з координатами $(X[i], Y[i])$, $i = 1, 2, \dots, n$ програма побудує гладку криву, використовуючи з'єднання кубічним В-сплайном. Крива В-сплайна може бути описана параметричними рівняннями.

Біля точки $(X[i], Y[i])$ вона приймає форму

$$X_i[t] = \frac{1}{6} \{ (-t^3 + 3t^2 - 3t + 1) X[i-1] + (3t^3 - 6t^2 + 3t) X[i] + (-3t^3 + 3t^2) X[i+1] + t^3 X[i+2] \}$$

та

$$Y_i[t] = \frac{1}{6} \{ (-t^3 + 3t^2 - 3t + 1) Y[i-1] + (3t^3 - 6t^2 + 3t) Y[i] + (-3t^3 + 3t^2) Y[i+1] + t^3 Y[i+2] \},$$

де $2 \leq i \leq n-2$. Координати рахуються біля кожної точки, змінюючи t від 0 до 1. На відміну від кривих сплайну, які проходять через вихідні точки даних $(X[i], Y[i])$, крива В-сплайну обгинає вихідні точки даних, не проходячи повз них;

- **Spline** – будує кубічний сплайн. Для використання даної опції значення X мають бути дискретними та зростаючими, а кількість точок даних не має перебільшувати 900.

Далі можна обрати стиль (**Style**), ширину (**Width**) та колір (**Color**) лінії. Також є опція заповнення області під кривою (**Fill Area Under Curve**).

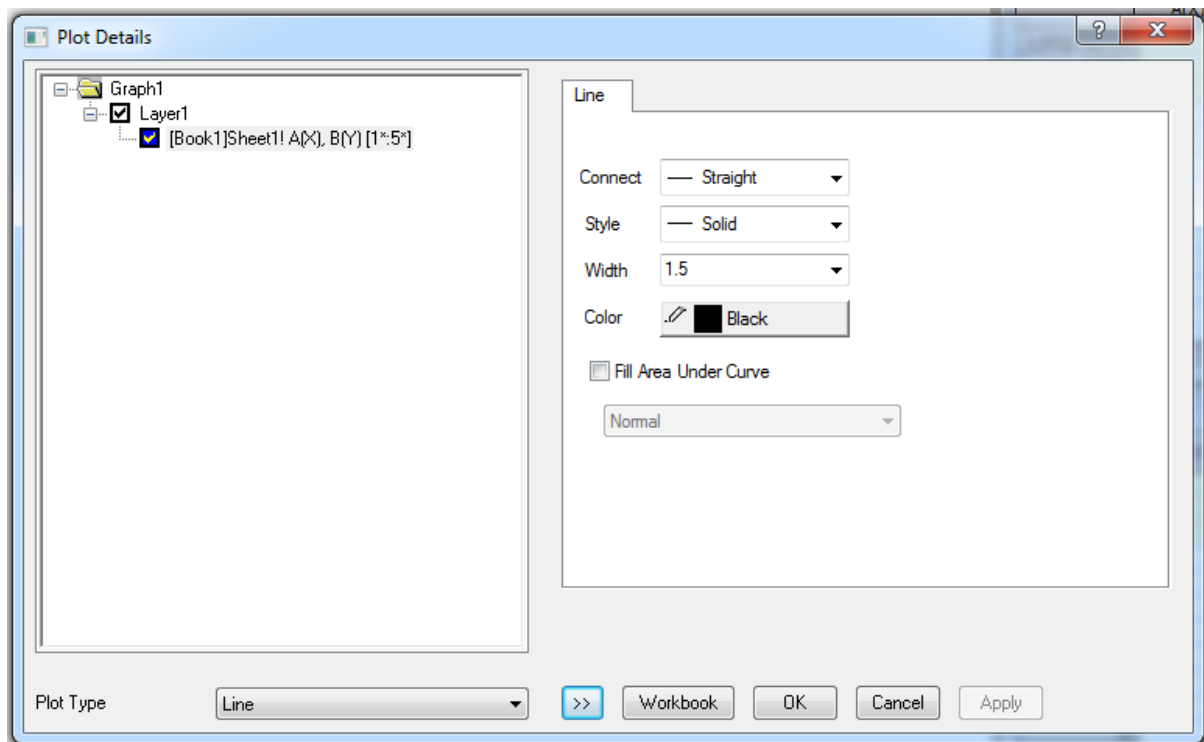


Рисунок 3.17 – Вкладка форматування даних на графіку **[Book1]Sheet1!A(X),B(Y)[1*.5*]** діалогового вікна **Plot Details** у режимі побудови лінії (**Line**).

На Рис. 3.18 показано вибір опції побудови графіку по точках за значеннями за таблиці даних: **Plot Type > Scatter**. У цьому режимі є дві вкладки. Перша вкладка **Symbol** дозволяє налаштувати розмір (**Size**), стиль (**Preview**), колір (**Symbol Color**) точок на графіку. Друга вкладка **Drop Lines** дозволяє відображати вертикальні чи горизонтальні лінії проекції для точок на графіку, а також задати необхідну кількість точок, які будуть пропущені на графіку (**Data Points Display Control > Skip Points**).

Іншими опціями побудови графіку є: **Plot Type > Line+Symbol** (лінія з точками) та **Plot Type > Column/Bar** (стовпчаста діаграма).

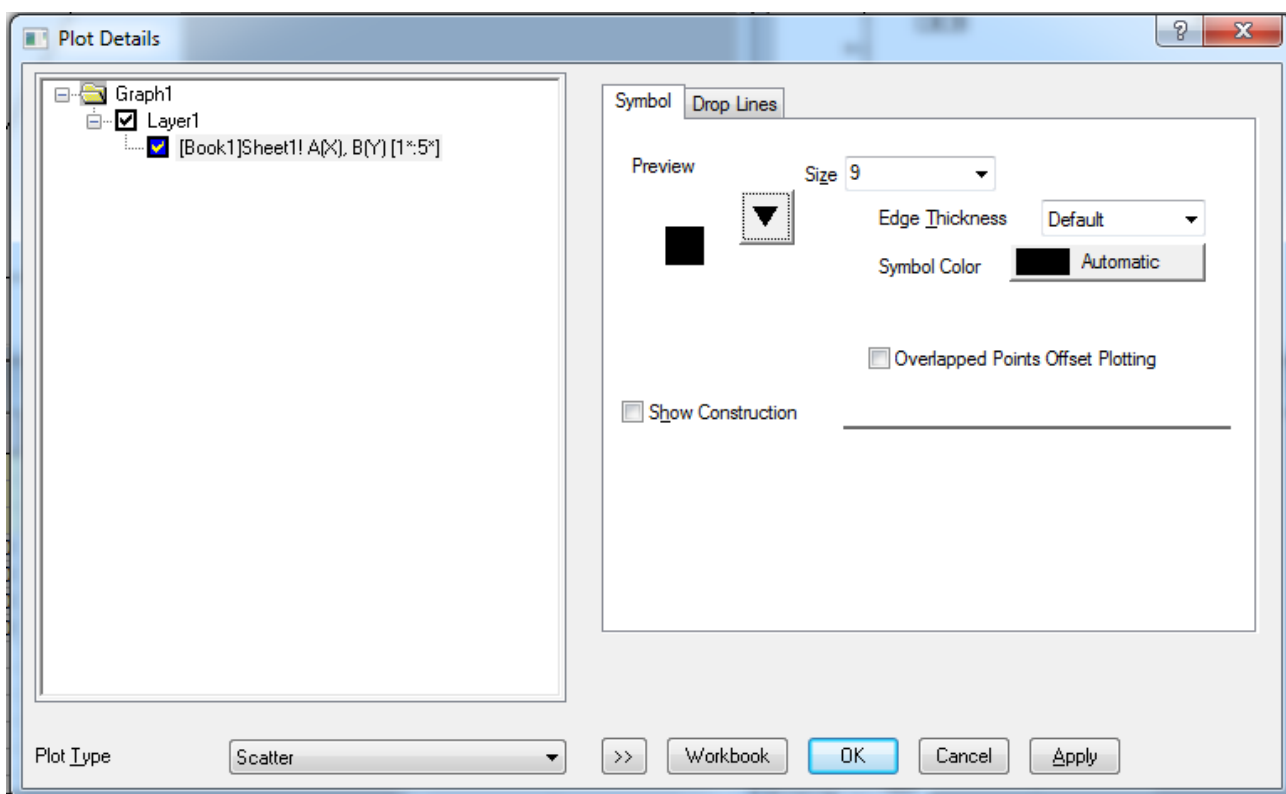

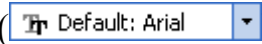
















Рисунок 3.18 – Вкладка форматування даних на графіку **[Book1]Sheet1!A(X),B(Y)[1*.5*]** діалогового вікна **Plot Details** у режимі побудови графіка по точкам (**Scatter**).

Додавання тексту та малюнків на графік

Для додавання тексту на графік потрібно на панелі інструментів **Tools** (Рис. 3.19) обрати опцію **Text Tool**  та клікнути лівою кнопкою мишки на місце, де має з'явитись текст. Зверху стане активною панель інструментів для редагування тексту **Format** (Рис. 3.20). В ній можна обрати шрифт () , розмір шрифту () , стиль (жирний  , курсивний  , з підкреслюванням ). Також є режим введення верхнього індексу (), режим введення нижнього індексу (), режим введення одночасно верхнього та нижнього індексу (), режим введення символів грецької абетки (), опція збільшення () або зменшення () розміру шрифту, вибір кольору шрифту ().

Також на графіку можна намалювати лінію, обравши на панелі інструментів **Tools** (Рис. 3.19) опцію **Line Tool** (), стрілку за допомогою опції **Arrow Tool** () або прямокутник, обравши **Rectangle Tool** ().

Додавати будь-які малюнки на графік з буфера обміну можна шляхом стандартної опції **Paste** з меню **Edit**.

Зображення всіх графіків, створених у проекті на одному графіку

Дуже корисною опцією при оформленні графіків є можливість зобразити всі графіки, створені у проекті, на одному графіку. Для цього потрібно зробити активним будь-яке з вікон графіків та у меню **Graph** обрати опцію **Merge Graph Windows > Open Dialog...** (Рис. 3.21).



Рисунок 3.19 – Панель інструментів **Tools**.

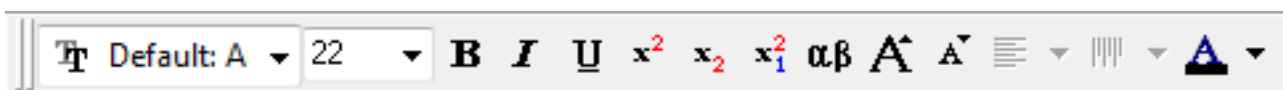


Рисунок 3.20 – Панель інструментів **Format**.

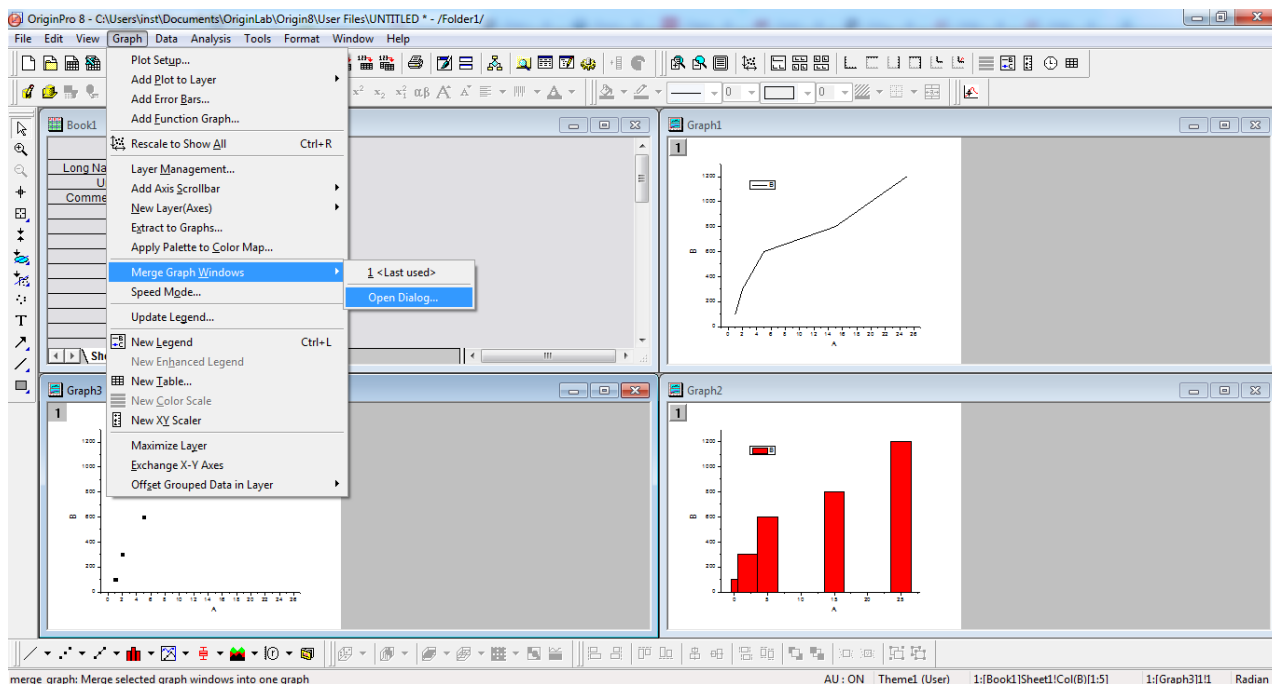


Рисунок 3.21 – Вибір опції зображення всіх графіків, створених у проєкті, на одному графіку **Merge Graph Windows**.

Далі відкриється діалогове вікно **Graph Manipulation: merge graph** (Рис. 3.22), де можна настроювати вид сторінки з графіками: їх розташування, розмір графіків та параметри сторінки.

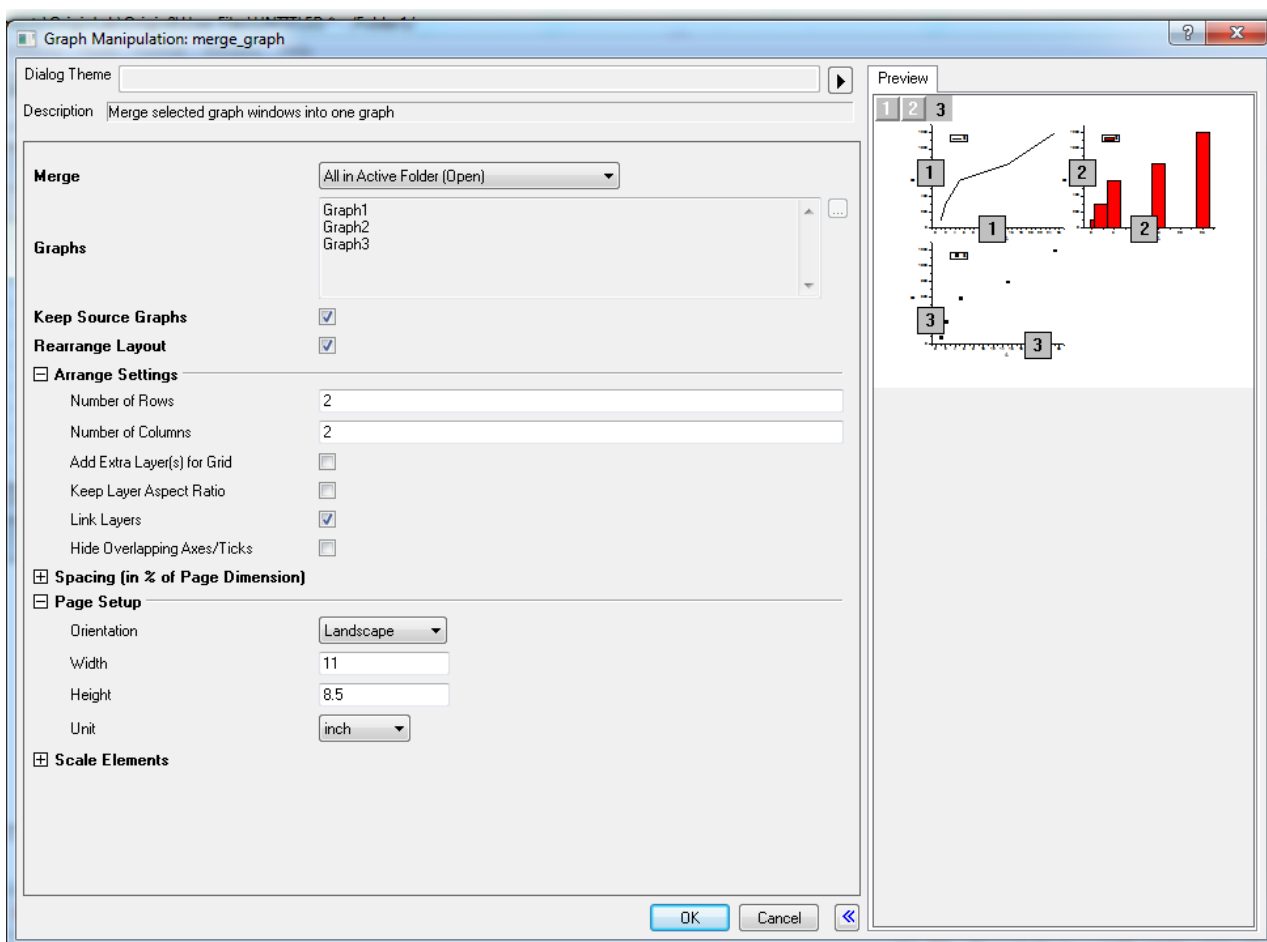


Рисунок 3.22 – Діалогове вікно для зображення всіх графіків, створених у проєкті, діалогове вікно **Graph Manipulation: merge graph**.

Побудова 3D графіків.

Мета роботи: засвоєння основ побудови 3D графіків.

Завдання роботи:

- навчитися будувати двовірні графіки у трьох вимірах;
- навчитися будувати тривимірні графіки зі значеннями координат X , Y , Z ;
- навчитися будувати графіки тривимірної поверхні;
- навчитися будувати тривимірний контурний графік;
- навчитися будувати графік потрійної діаграми.

Теоретичні відомості

Тривимірний (3D) графік – це графік, положення точки в якому визначається значенням трьох координат.

Як відомо, прямокутна (або декартова) система координат складається з заданої фіксованої точки O простору (початок координат) та трьох перпендикулярних прямих простору OX , OY та OZ , що не лежать в одній площині та перетинаються у початку координат. Ці прямі називають координатними осями: OX – вісь абсцис, OY – вісь ординат та OZ – вісь аплікват. Положення точки M у просторовій системі координат визначається значенням трьох координат і позначається $M(x,y,z)$. Відповідно три площини, що містять пари координатних осей, називають координатними площинами XY , XZ та YZ .

Нижче наведено перелік основних 3D графіків, які можна побудувати у програмному середовищі OriginPro:

- 3D XYZ (відображення двовірних графіків у трьох вимірах);
- 3D XYZ (тривимірні графіки зі значеннями координат X , Y , Z);
- 3D Surface (графіки тривимірної поверхні);
- XYZ contour (тривимірний контурний графік);
- Ternary plot (потрійна діаграма).

Побудова 3D ХУУ графіків

Розглянемо побудову графіка типу 3D waterfall ХУУ, який являє собою так званий графік водоспаду. Для цього у таблиці даних додати додатковий стовпчик С(У) (як показано на Рис. 1.5), ввести дані до усіх стовпчиків А(Х), В(У), С(У), виділити їх та обрати в меню **Plot** в пункті **3D ХУУ** опцію **3D waterfall** (Рис. 4.1). В результаті отримаємо графік, наведений на Рис. 4.2.

На Рис. 4.3 наведено графік типу 3D walls ХУУ, побудований аналогічним чином та за тими ж даними, що і графік на Рис. 4.2, обравши в меню **Plot** в пункті **3D ХУУ** опцію **3D walls** (Рис. 4.1).

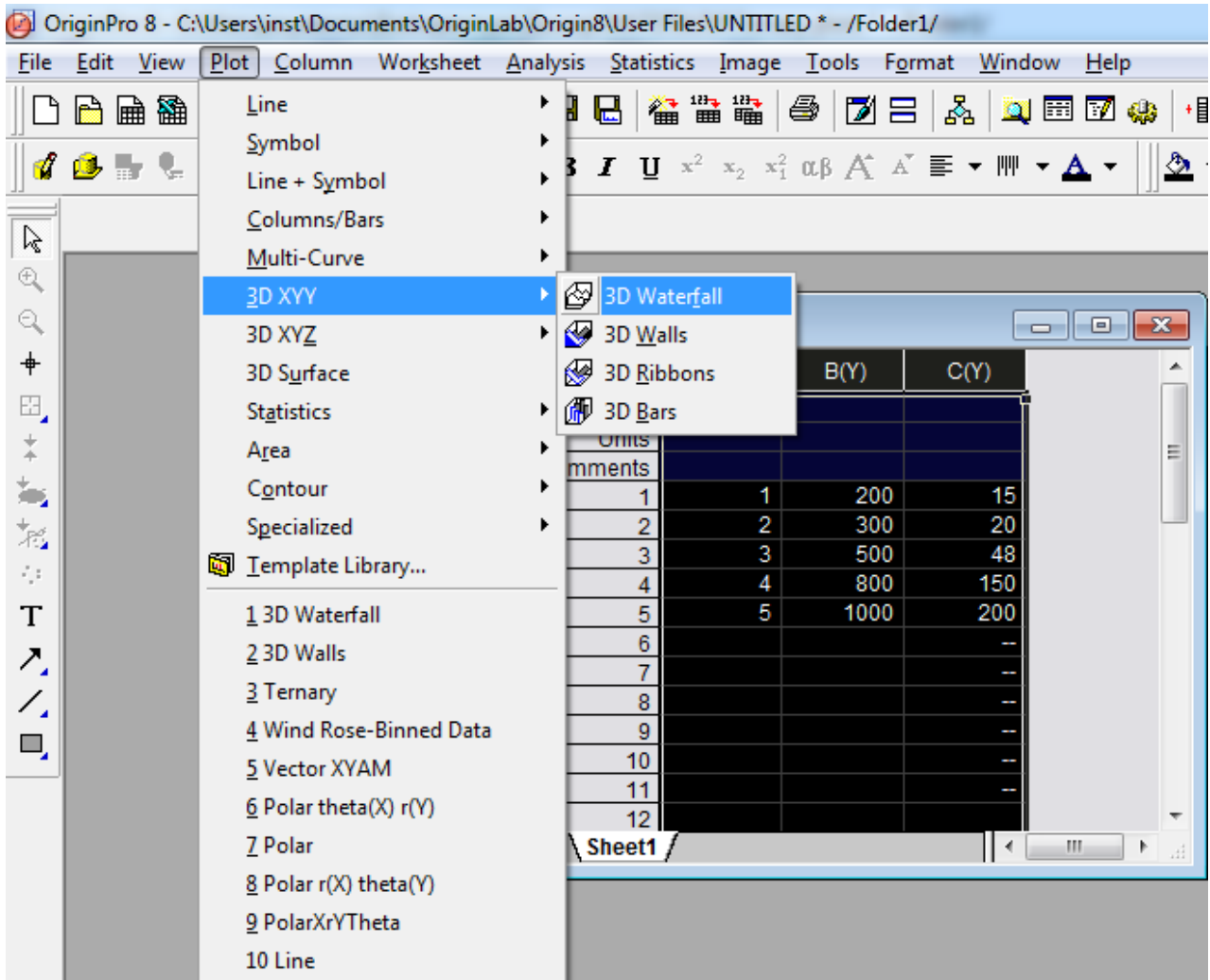


Рисунок 4.1 – Вибір опції **3D waterfall** в пункті **3D ХУУ** меню **Plot**.

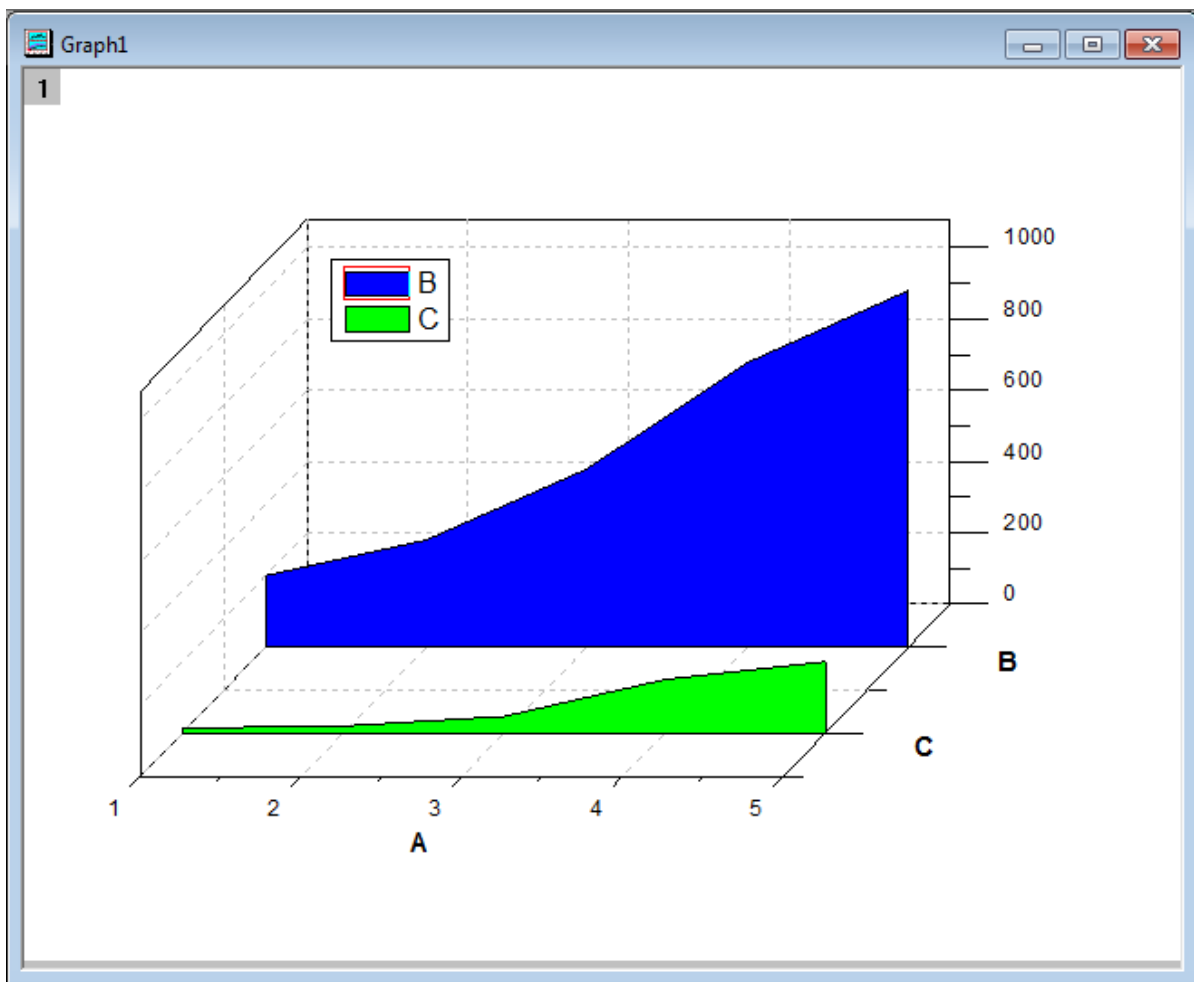


Рисунок 4.2 – Вигляд графіку **3D waterfall** типу 3D XYU.

На Рис. 4.4 наведено графік типу 3D ribbons XYU, побудований аналогічним чином та за тими ж даними, що і графік на Рис. 4.2, обравши в меню **Plot** в пункті **3D XYU** опцію **3D ribbons** (Рис. 4.1).

На Рис. 4.5 наведено графік типу 3D bars XYU (стовпчастий графік), побудований аналогічним чином та за тими ж даними, що і графік на Рис. 4.2, обравши в меню **Plot** в пункті **3D XYU** опцію **3D bars** (Рис. 4.1).

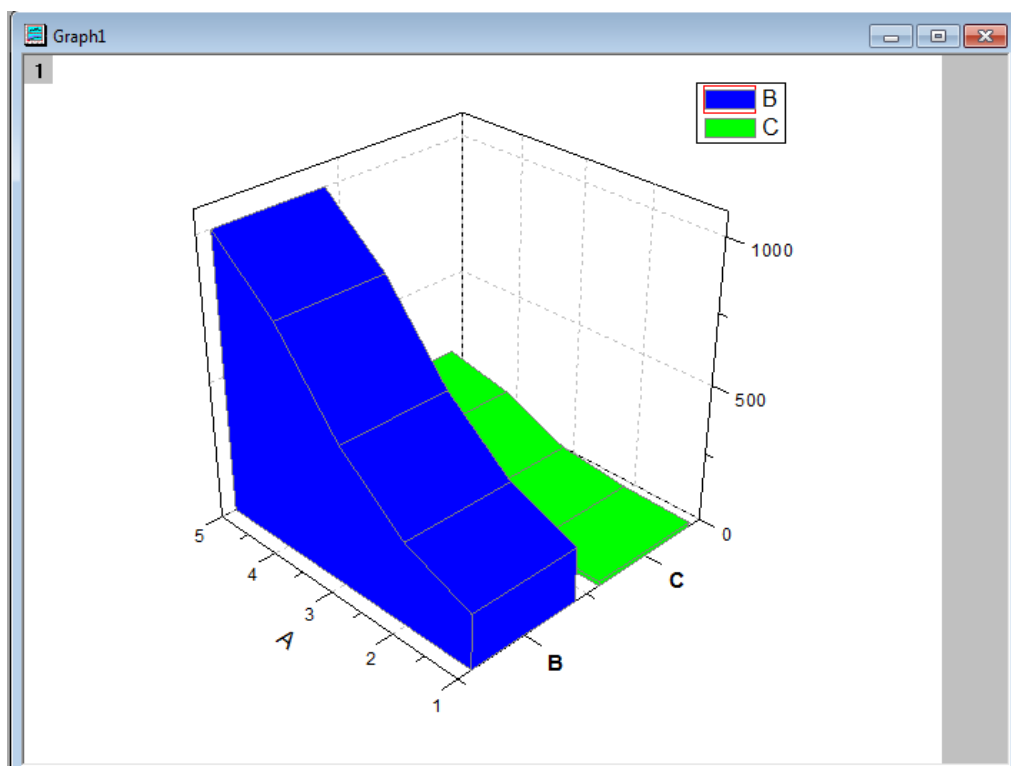


Рисунок 4.3 – Вигляд графіку **3D walls** типу 3D XYY.

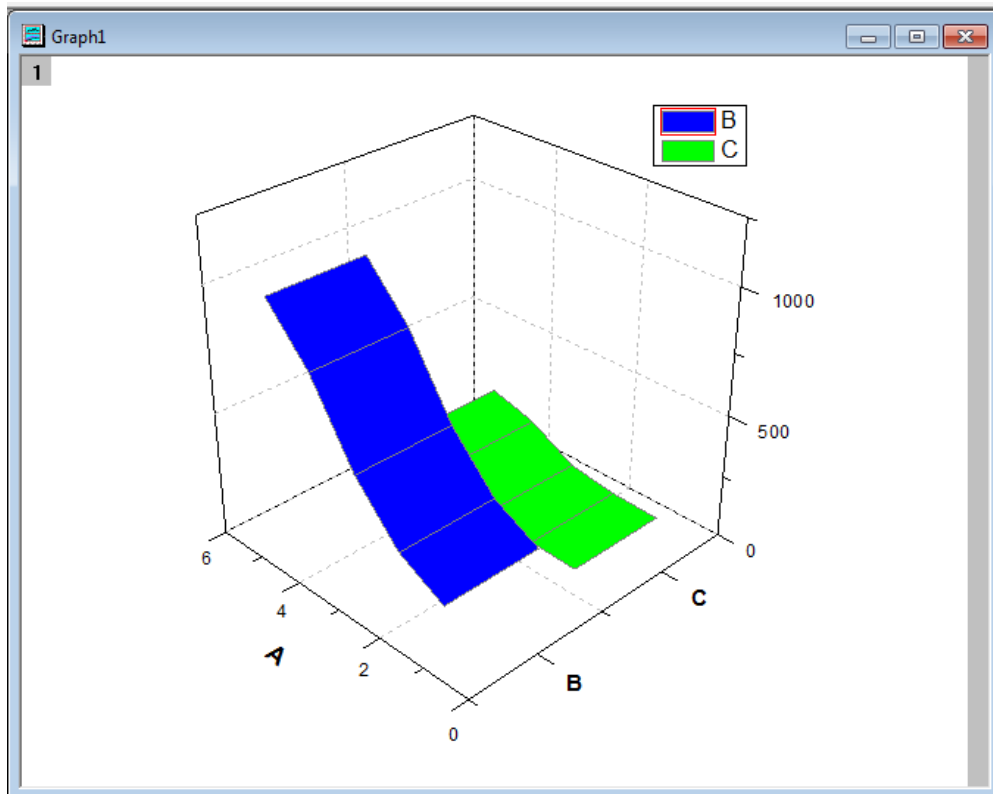


Рисунок 4.4 – Вигляд графіку **3D ribbons** типу 3D XYY.

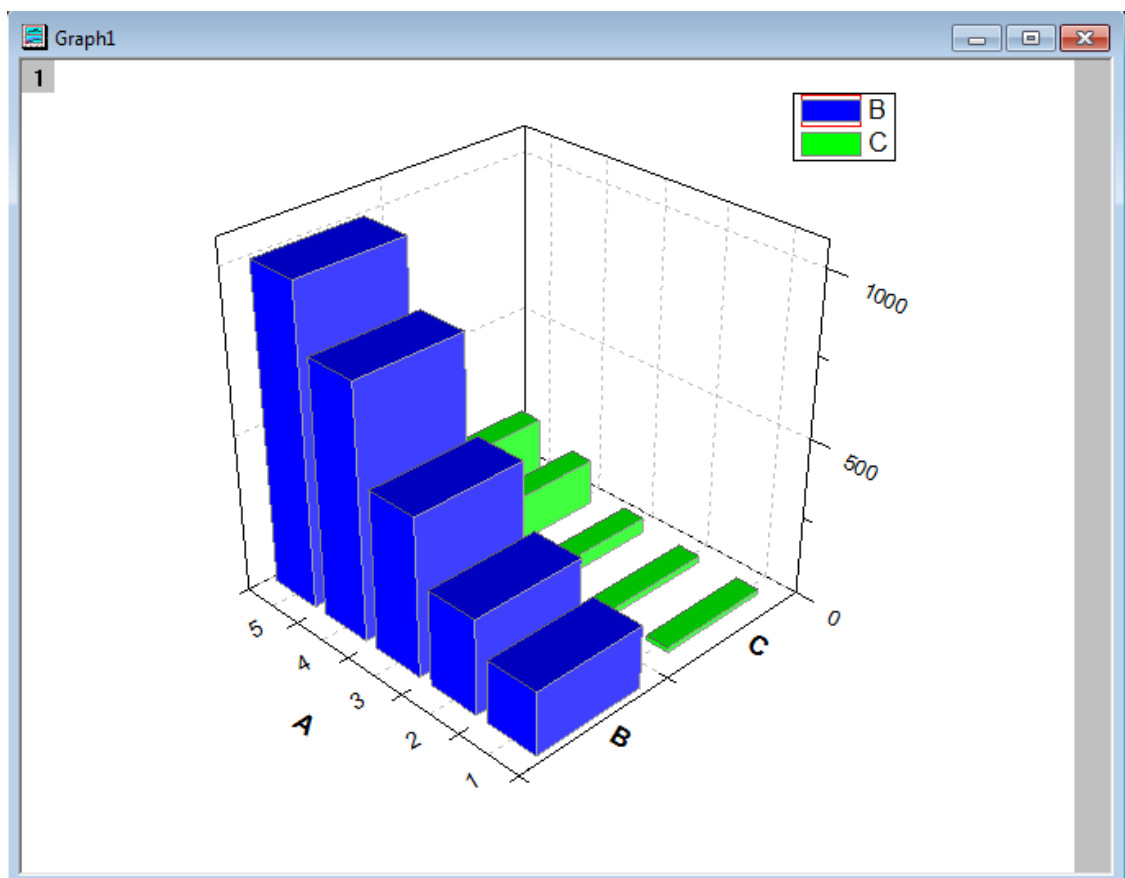


Рисунок 4.5 – Вигляд графіку **3D bars** типу 3D XY \bar{Y} .

Побудова 3D XYZ графіків

Для побудови 3D XYZ графіків в таблицю даних потрібно додати додатковий стовпчик C(Y) (як показано на Рис. 1.5) та змінити його з Y на Z, шляхом обирання цього стовпчику та опції **Set as Z** в меню **Column** (Рис. 4.6).

Для побудови тривимірного графіка по точках потрібно обрати всі три стовпчики A(X), B(Y) та C(Z) і в меню **Plot** обрати пункт **3D XYZ** і далі підпункт **3D scatter** (Рис. 4.7). В результаті отримаємо тривимірний графік по точках, наведений на Рис. 4.8.

Аналогічним чином можна побудувати тривимірний графік у вигляді точок, сполучених лінією з проекцією на площину XY, обравши в меню **Plot** пункт **3D XYZ** опцію **3D trajectory** (Рис. 4.7). В результаті отримаємо тривимірний графік по точках, наведений на Рис. 4.9.

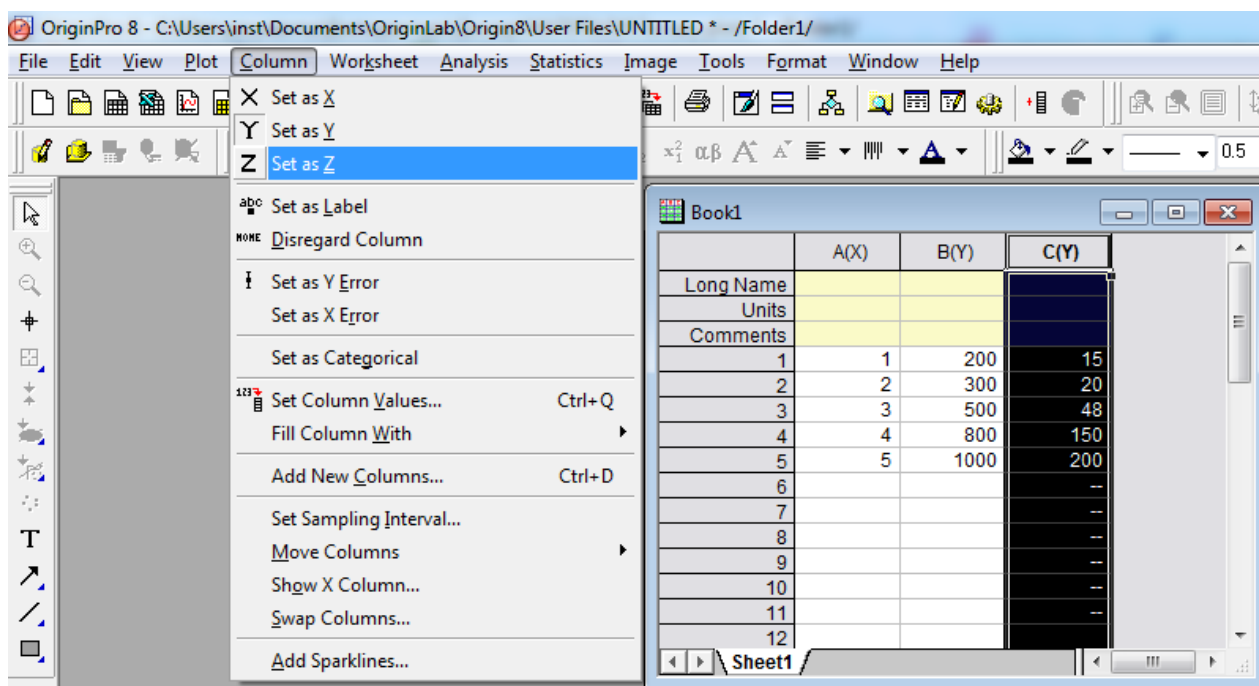


Рисунок 4.6 – Зміна значення стовпчика C з Y на Z за допомогою опції **Set as Z**.

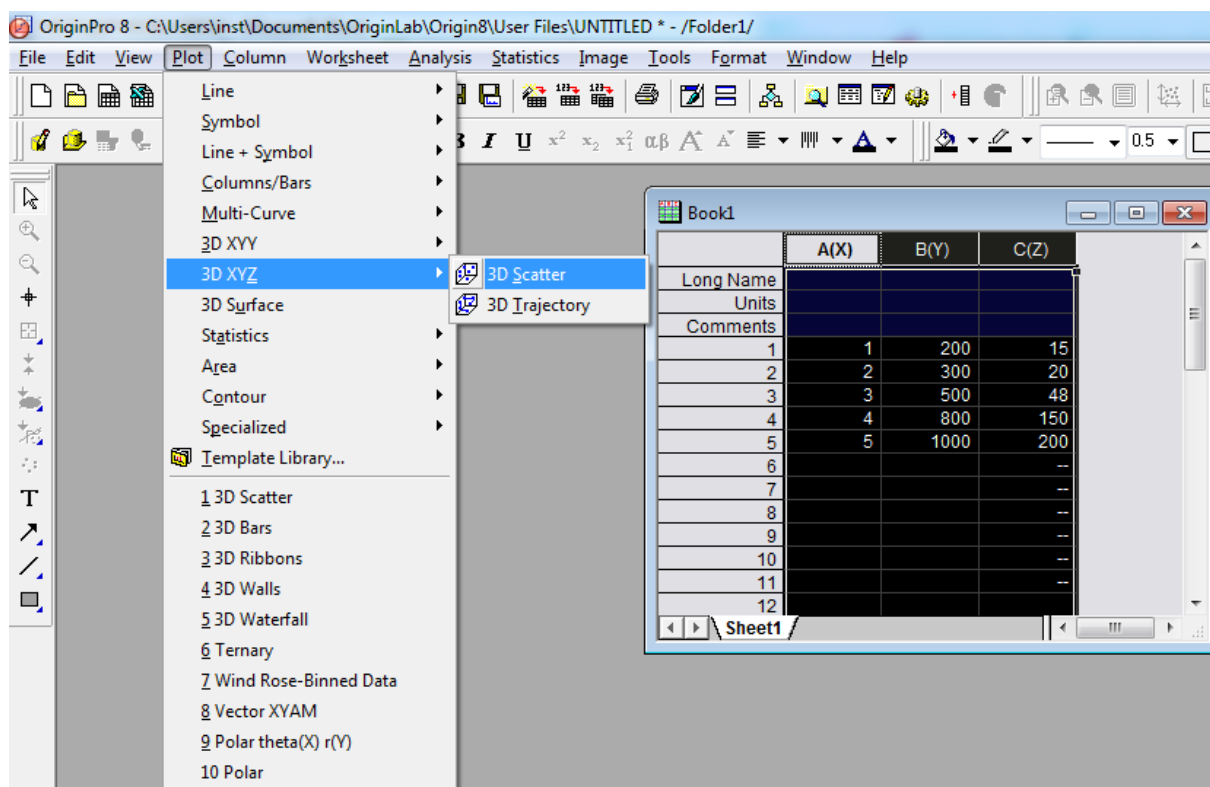


Рисунок 4.7 – Вибір опції **3D scatter** для побудови тривимірного точкового графіка.

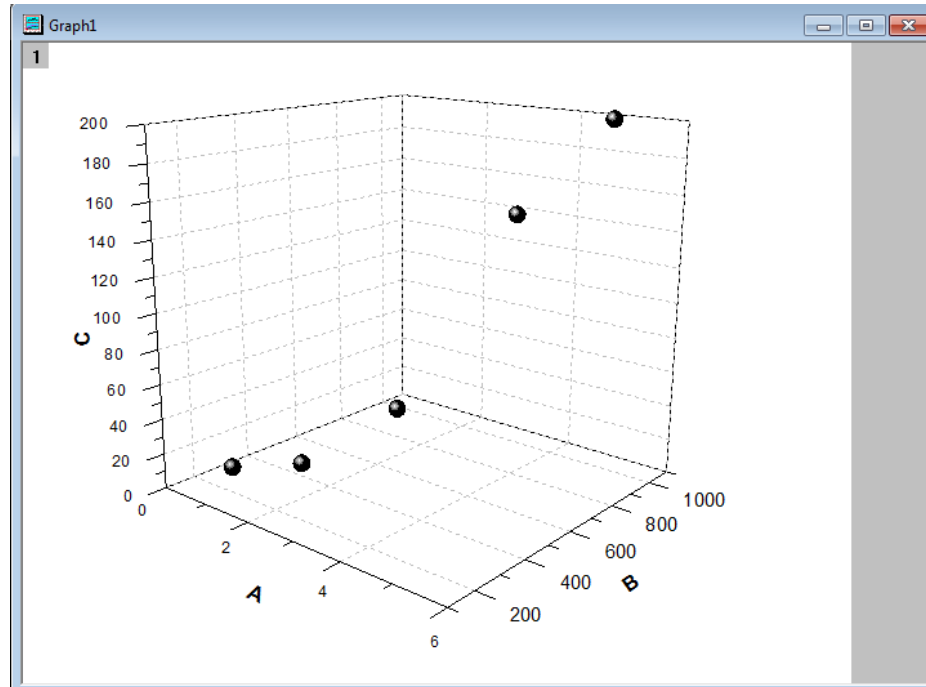


Рисунок 4.8 – Тривимірний графік по точках, побудований за допомогою опції **3D scatter**.

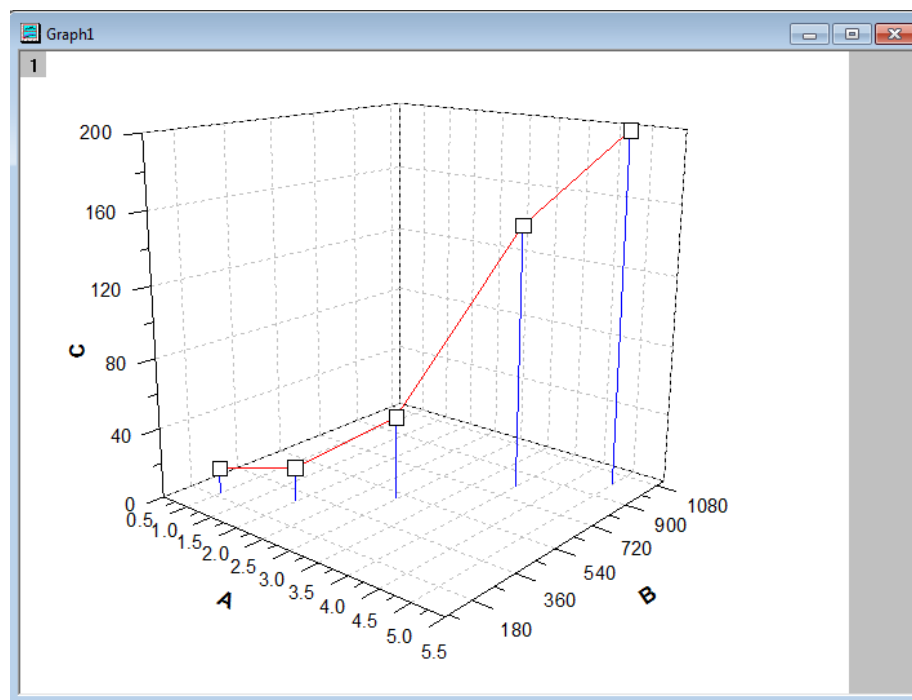


Рисунок 4.9 – Тривимірний графік по точках, побудований за допомогою опції **3D trajectory**.

Побудова 3D Surface графіків

Для побудови графіка тривимірної поверхні потрібно конвертувати таблицю даних зі стовпчиками A(X), B(Y) та C(Z) до матриці шляхом обирання в меню **Worksheet** пункт **Convert to Matrix**, потім **Direct** (Рис. 4.10) і далі натиснути ОК. В результаті отримаємо матрицю з даними. Потім виділяємо дані в цій матриці й в меню **Plot** обираємо пункт **3D Surface** та підпункт **Color Fill Surface** (Рис. 4.11). В результаті отримаємо графік, показаний на Рис. 4.12.

Побудова тривимірних контурних графіків

Для побудови графіка тривимірної поверхні потрібно конвертувати таблицю даних зі стовпчиками A(X), B(Y) та C(Z) до матриці шляхом обирання в меню **Worksheet** пункт **Convert to Matrix**, потім **Direct** (Рис. 4.10) і далі натиснути ОК. Далі для побудови тривимірного контурного графіка (ізолінії) потрібно обрати дані в стовпчиках A(X), B(Y) та C(Z), потім в меню **Plot** обираємо пункт **Contour** та підпункт **Contour - Color Fill** (Рис. 4.13). В результаті отримаємо графік, показаний на Рис. 4.14.

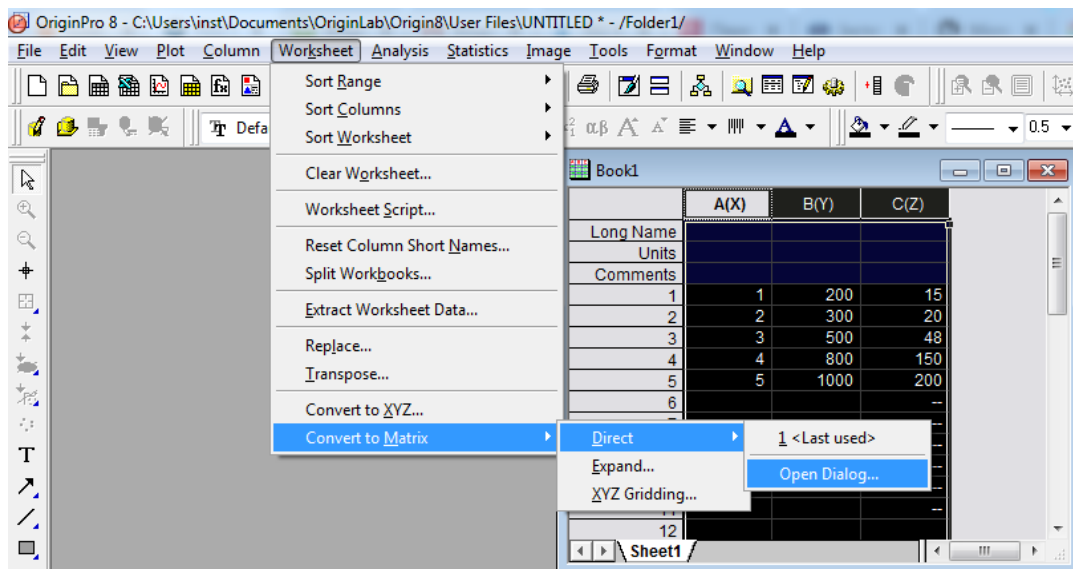


Рисунок 4.10 – Перетворення таблиці даних до матриці за допомогою опції **Convert to Matrix**.

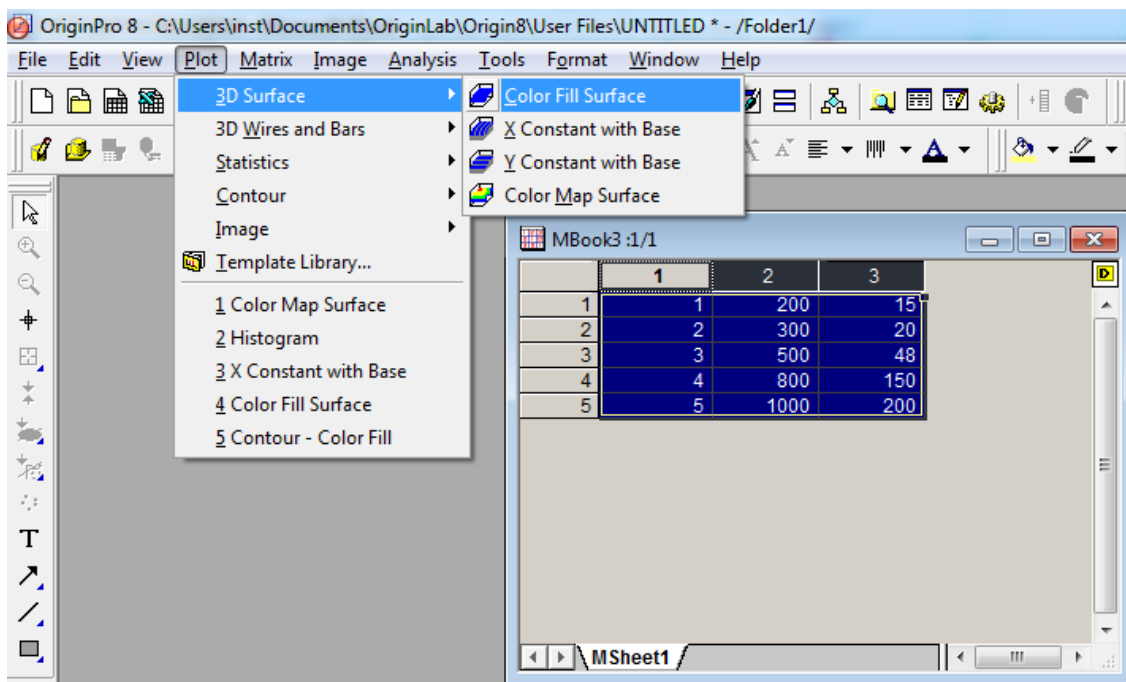


Рисунок 4.11 – Вибір опції побудови тривимірного графіка **Color Fill Surface**.

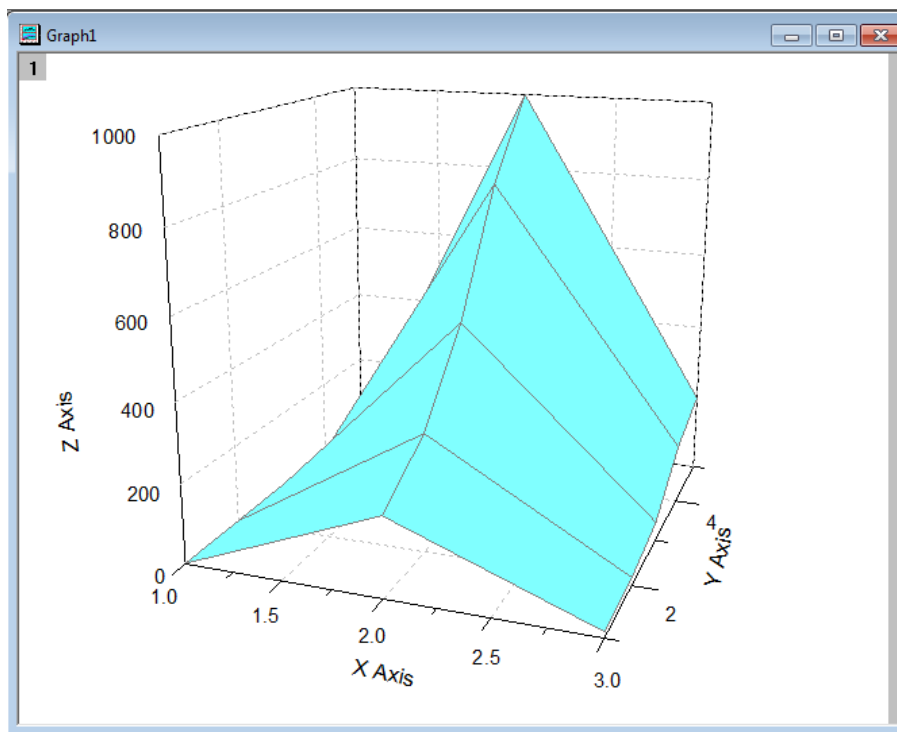


Рисунок 4.12 – Тривимірний графік, побудований за допомогою опції **Color Fill Surface**.

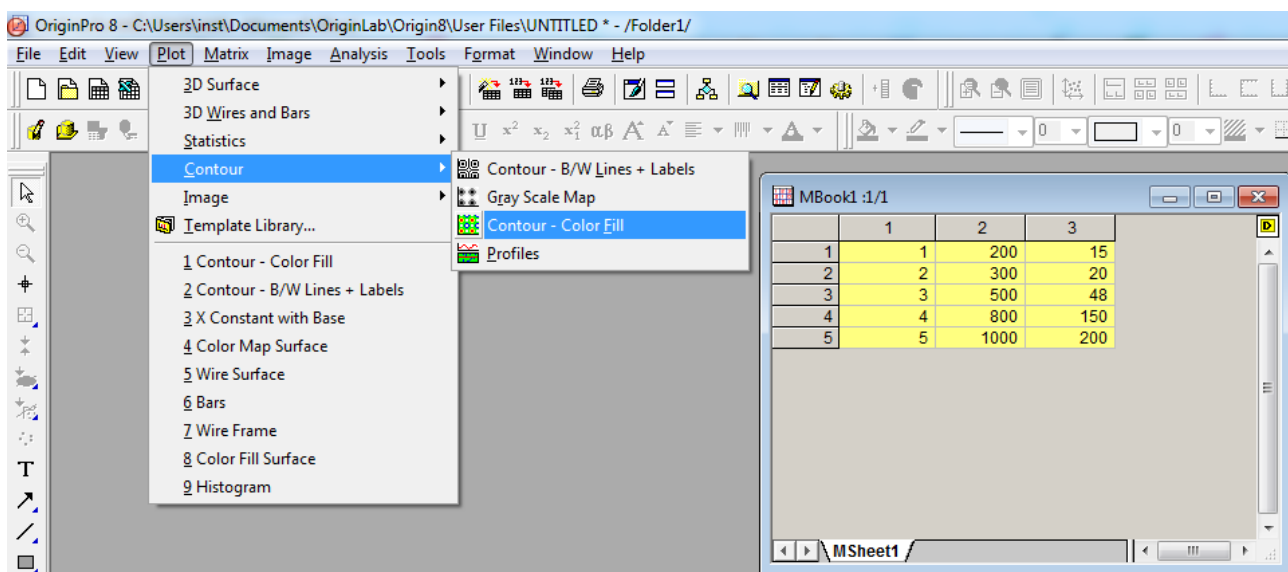


Рисунок 4.13 – Вибір опції побудови тривимірного графіка **Contour - Color Fill**.

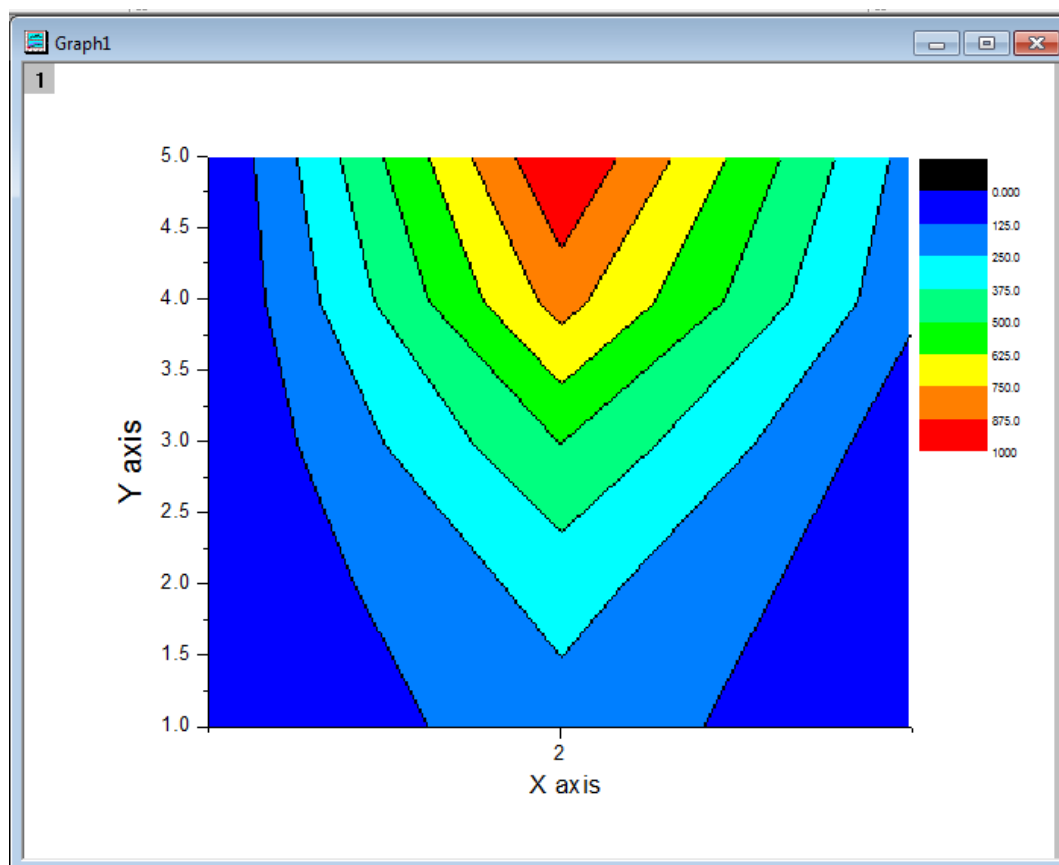


Рисунок 4.14 – Контурний графік, побудований за допомогою опції **Contour - Color Fill**.

Ternary plot (потрійна діаграма)

В сполуках, що складаються з трьох компонентів, на відміну від двокомпонентних, додається ще одна незалежна змінна – концентрація третьої компоненти, тому діаграма стану будують в трьох координатах, тобто у просторі. Основою такої просторової фігури є зазвичай рівносторонній (правильний) трикутник, що називається координатним трикутником, за яким визначають концентрації всіх трьох компонентів у будь-якому сплаві системи.

Для прикладу побудуємо потрійну діаграму для плівок аморфного карбонітриду кремнію ($a\text{-SiC}_x\text{N}_y$), що мають різні концентрації кремнію (Si), вуглецю (C) та азоту (N). Для цього треба спочатку в таблицю даних додати додатковий стовпчик C(Y) (як показано на Рис. 1.5) та змінити його з Y на Z, шляхом обирання цього стовпчику та опції **Set as Z** в меню **Column** (Рис. 4.6). Також для зручності можна перейменувати стовпчики A, B, C на назву відповідних елементів Si, N, C (для цього потрібно виділити кожний стовпчик окремо, натиснути правою кнопкою миші, обрати пункт **Properties...** та змінити **Short Name**). Далі виділяємо всі три стовпчики X, Y, Z зі значеннями концентрації Si, N, C та обираємо в меню **Plot** пункт **Specialized** та опцію **Ternary** (Рис. 4.15). В результаті отримаємо потрійну діаграму системи $a\text{-SiC}_x\text{N}_y$, як показано на Рис. 4.16.

Керування 3D зображенням

Для керування зображенням при створенні тривимірних графіків на панелі інструментів автоматично з'являється **3D Rotation toolbar**



, за допомогою якого можна перевертати, змінювати розмір та розтягувати тривимірні графіки. Розглянемо окремо кожну функцію даної панелі інструментів.

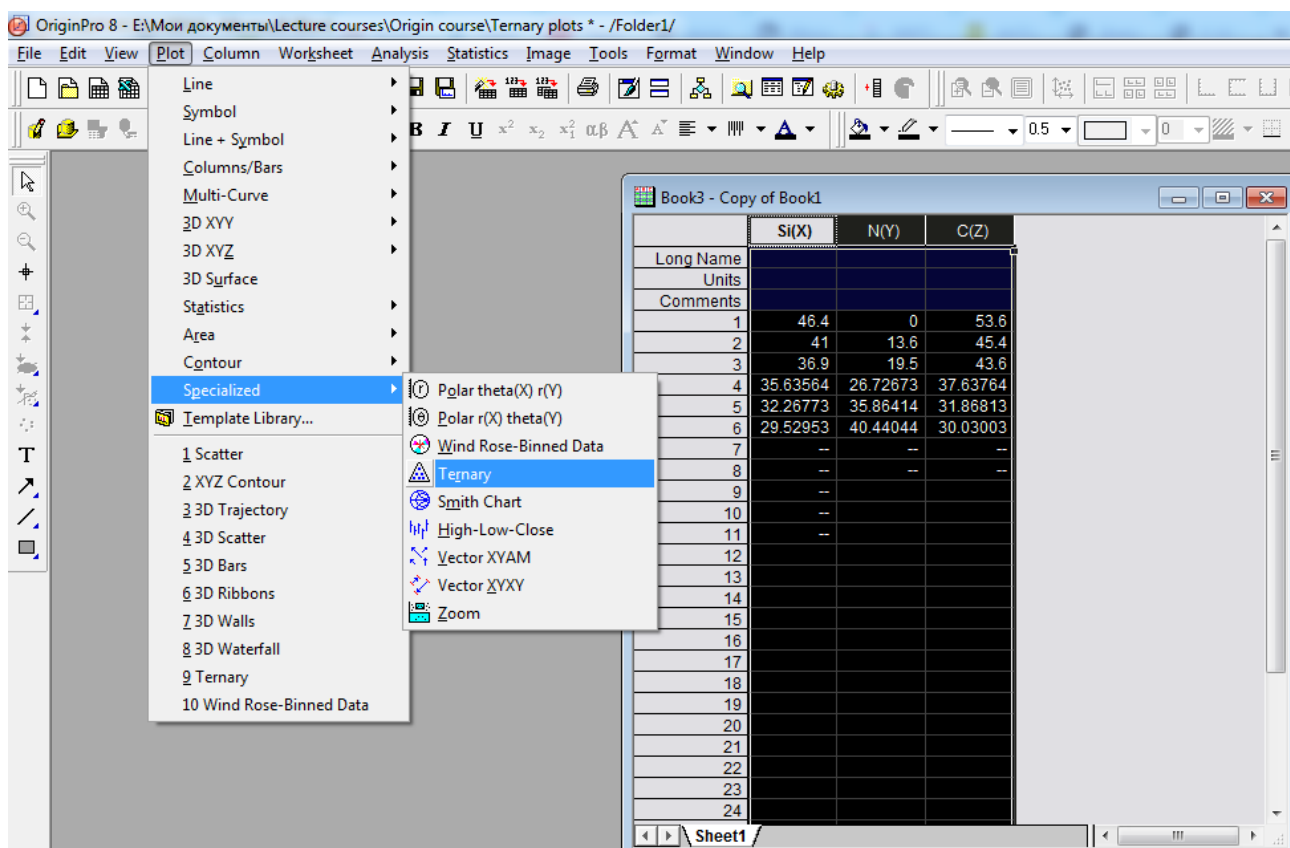


Рисунок 4.15 – Вибір опції побудови тривимірного графіка **XYZ contour**.

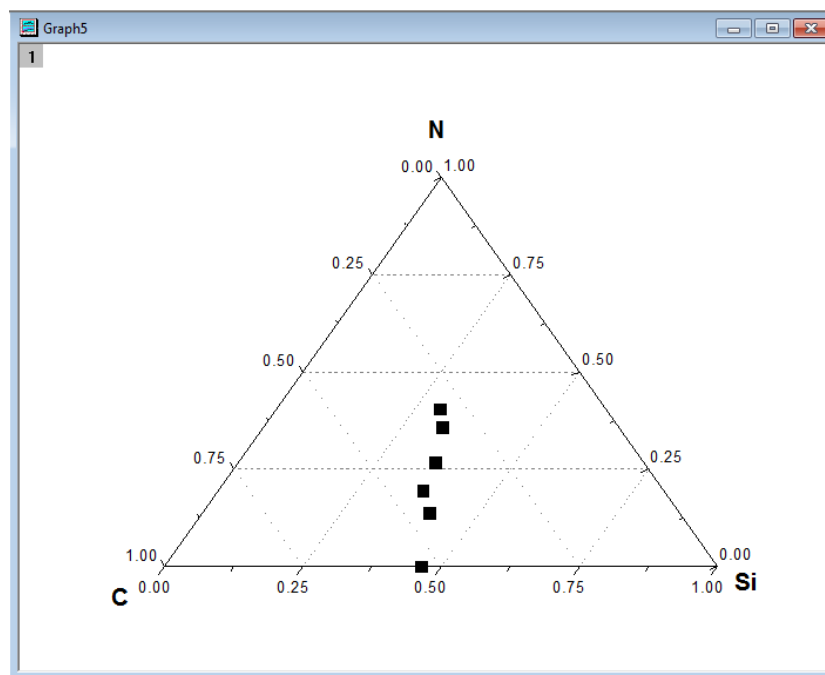


Рисунок 4.16 – Приклад діаграми потрійної системи Si-C-N, побудованої за допомогою опції **Ternary**.



– перевертає графік у будь-якому напрямі.



– перевертає графік проти годинникової стрілки вздовж Z вісі на визначений кут повороту (для 3D XYU перевертає графік проти годинникової стрілки вздовж Y вісі, для потрійних діаграм перевертає графік проти годинникової стрілки вздовж Z вісі).



– перевертає графік за годинниковою стрілкою вздовж Z вісі на визначений кут повороту (для 3D XYU перевертає графік за годинниковою стрілкою вздовж Y вісі, для потрійних діаграм перевертає графік за годинниковою стрілкою вздовж Z вісі).



– нахиляє графік проти годинникової стрілки на визначений кут.



– нахиляє графік за годинниковою стрілкою на визначений кут.



– нахиляє графік донизу вздовж X вісі на визначений кут.



– нахиляє графік догори вздовж X вісі на визначений кут.



– збільшує кут перспективи на 3 градуси.



– зменшує кут перспективи на 3 градуси.



– підганяє розмір графіка до розміру шару.



– скидає тільки кут куба та кут перспективи до значень за замовчуванням.



– скидає обертання куба, довжину вісі, проекцію до значень за замовчуванням.



– обрати або вказати кут обертання (у градусах) для кнопок обертання.

КОМП'ЮТЕРНИЙ ПРАКТИКУМ №5

Апроксимація графічних даних.

Мета роботи: засвоєння основ апроксимації графічних даних.

Завдання роботи:

- ознайомитись з типами апроксимації у програмному середовищі OriginPro;
- навчитися проводити лінійну апроксимацію точок на графіку;
- навчитися проводити поліноміальну апроксимацію точок на графіку;
- навчитися проводити нелінійну апроксимацію точок на графіку.

Теоретичні відомості

Важливим етап обробки експериментальних даних є процес їх апроксимації, який полягає у побудові наближеної функції, яка найбільш близько проходить біля експериментально отриманих точок або заданої неперервної функції. Програмне середовище OriginPro дозволяє апроксимувати графічні дані за допомогою наступних функцій:

- лінійної;
- параболічної;
- гіперболічної;
- сигмоїдальної;
- експоненціальної;
- логарифмічної;
- раціональної;
- степеневі.

Лінійна апроксимація точок на графіку

Для апроксимації точок на графіку за допомогою лінійної функції потрібно зробити цей графік активним і обрати в меню **Analysis** обрати **Fitting** далі

підпункт **Fit Linear** та **Open Dialog...** (Рис. 5.1). Далі відкриється діалогове вікно **Linear Fit**, де можна змінити параметри лінійної апроксимації, потім натиснути **OK**. В результаті з'явиться пряма лінія, що описується рівнянням $y=a+b*x$ (Рис. 5.2).

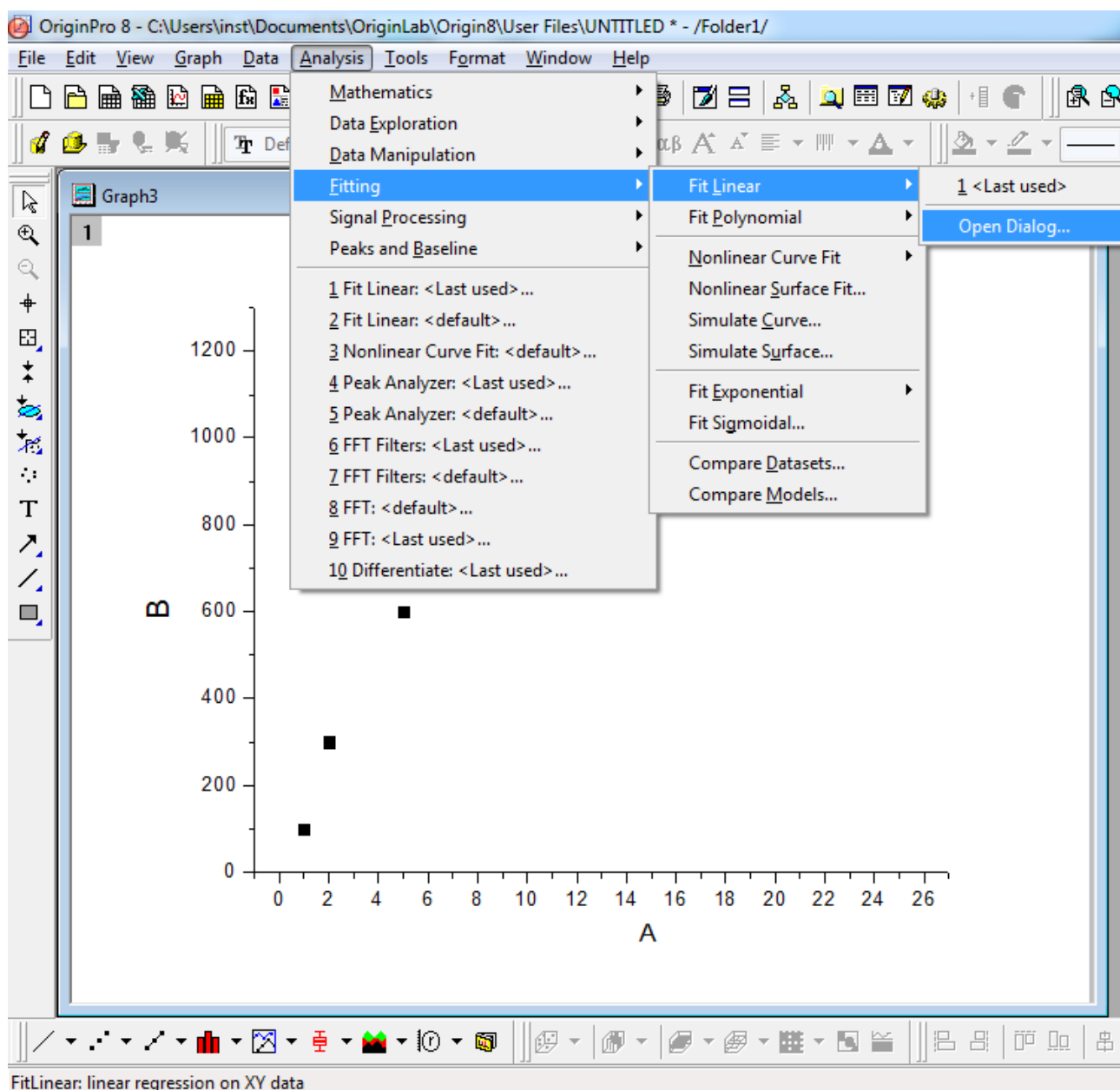


Рисунок 5.1 – Вибір опції лінійної апроксимації точок на графіку **Fit Linear**.

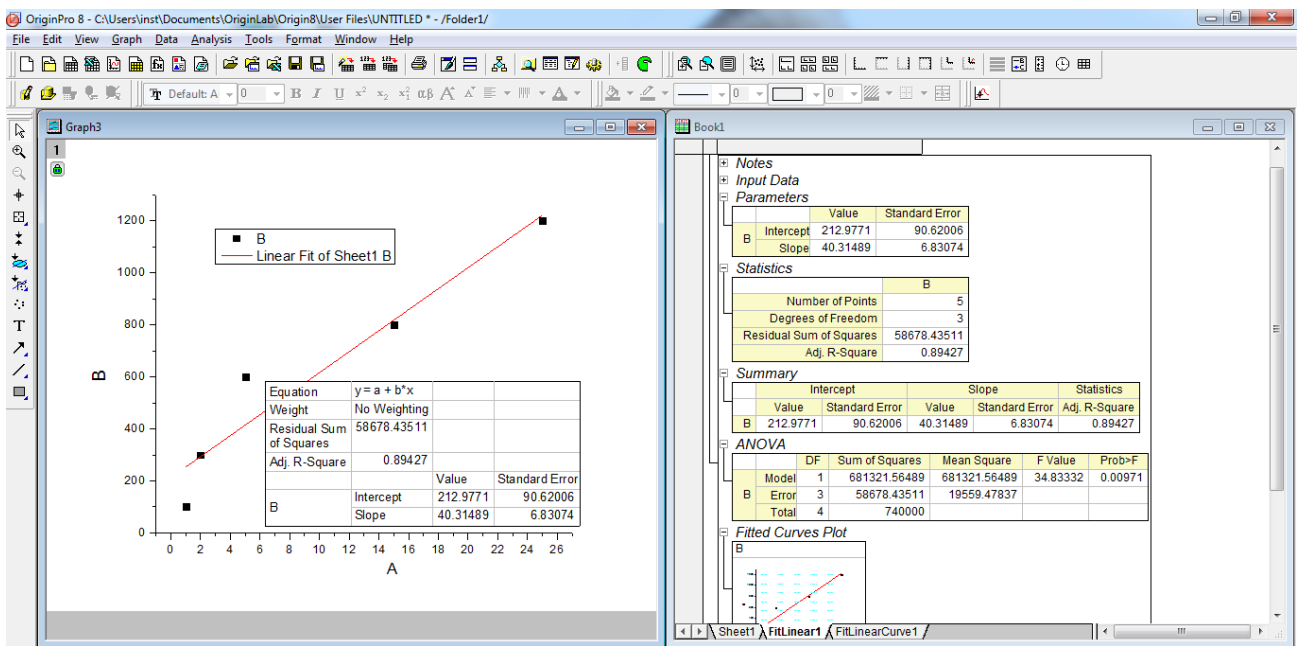


Рисунок 5.2 – Результат лінійної апроксимації за допомогою опції **Fit Linear**.

На графіку з'явиться таблиця з даними апроксимації, де **Intercept** відповідає a , а **Slope** відповідає b у функції $y = a + b \cdot x$. У таблиці даних з'являться додаткові вкладки з параметрами апроксимації (**FitLinear1**) та даними кривої для апроксимації (**FitLinearCurve1**).

Параболічна апроксимація точок на графіку

Для апроксимації точок на графіку за допомогою параболічної функції потрібно зробити цей графік активним і обрати в меню **Analysis** обрати **Fitting** далі підпункт **Fit Polynomial** та **Open Dialog...** (Рис. 5.3). Далі відкриється діалогове вікно **Polynomial Fit**, де можна змінити параметри лінійної апроксимації, потім натиснути **OK**. В результаті з'явиться пряма лінія, що описується рівнянням $y = a + B1 \cdot x + B2 \cdot x^2$ (Рис. 5.4).

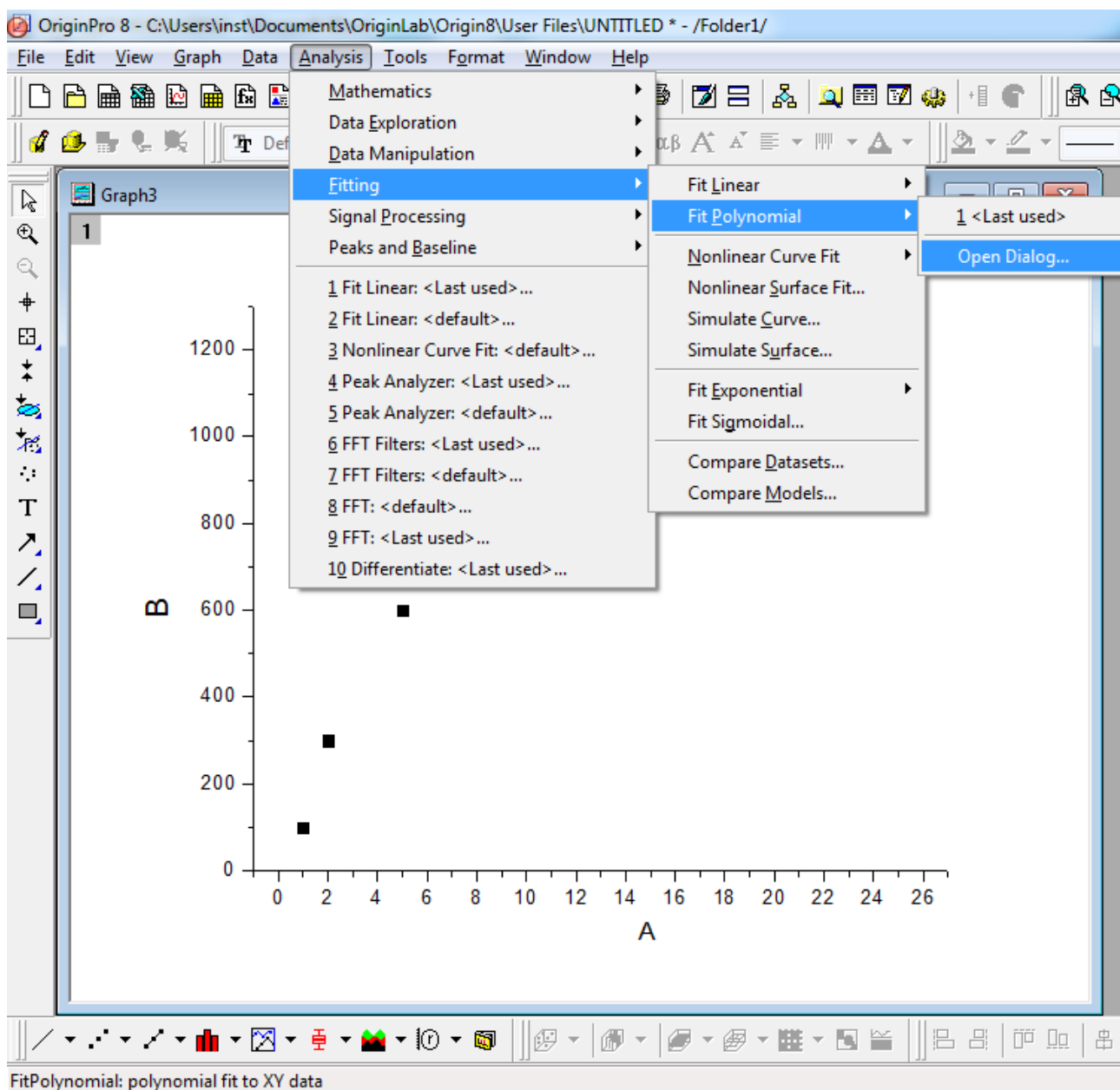


Рисунок 5.3 – Вибір опції параболічної апроксимації точок на графіку **Fit Polynomial**.

На графіку з'явиться таблиця з даними апроксимації, де **Intercept** відповідає a у функції $y = a + B1 * x + B2 * x^2$. У таблиці даних з'являться додаткові вкладки з параметрами апроксимації (**FitPolynomial1**) та даними кривої для апроксимації (**FitPolynomialCurve1**).

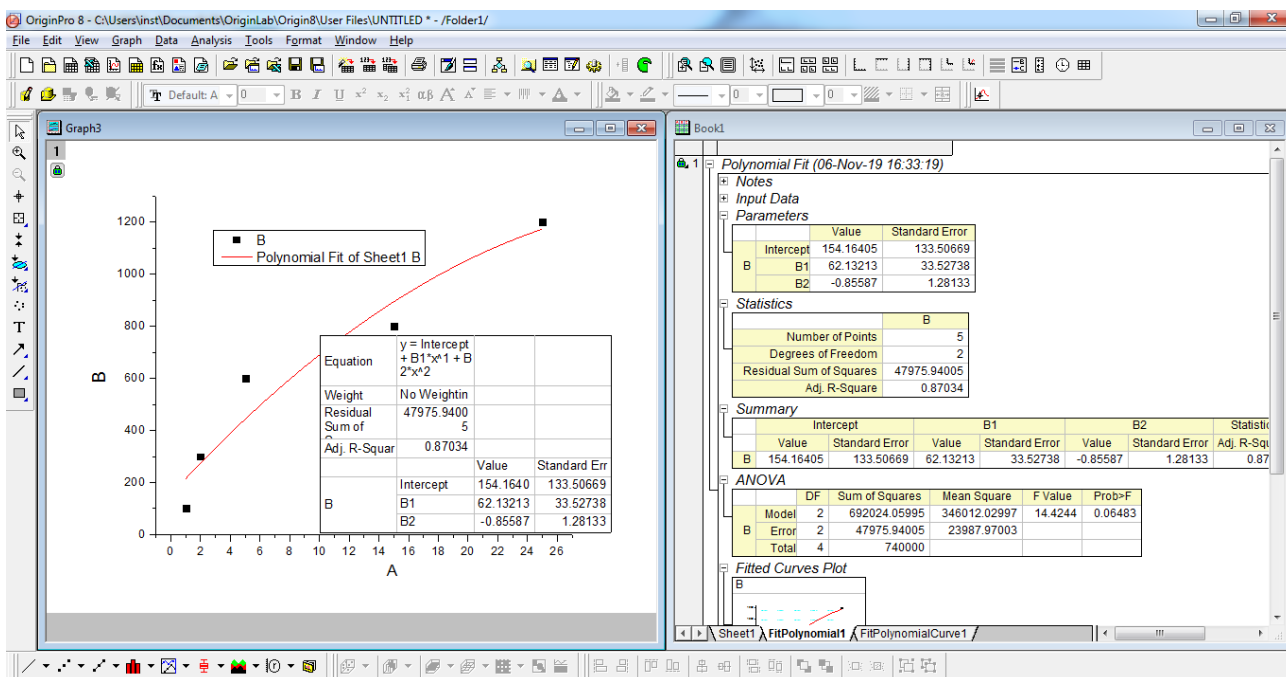


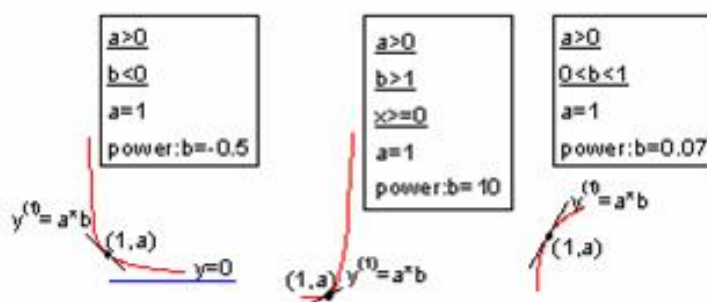
Рисунок 5.4 – Результат поліноміальної апроксимації за допомогою опції **Fit Polynomial**.

Нелінійна апроксимація точок на графіку

Для апроксимації точок на графіку за допомогою нелінійної функції потрібно зробити цей графік активним і обрати в меню **Analysis** обрати **Fitting** далі підпункт **Nonlinear Curve Fit** та **Open Dialog...** (Рис. 5.5). Відкриється діалогове вікно нелінійної апроксимації **Dialog** (Рис. 5.6).

У пункті **Category** першим пунктом є базові функції (**Origin Basic Functions**), які можна обрати в пункті **Function**. Серед них:

- степенева/алометрична функція (**Allometric1**) $y = ax^b$



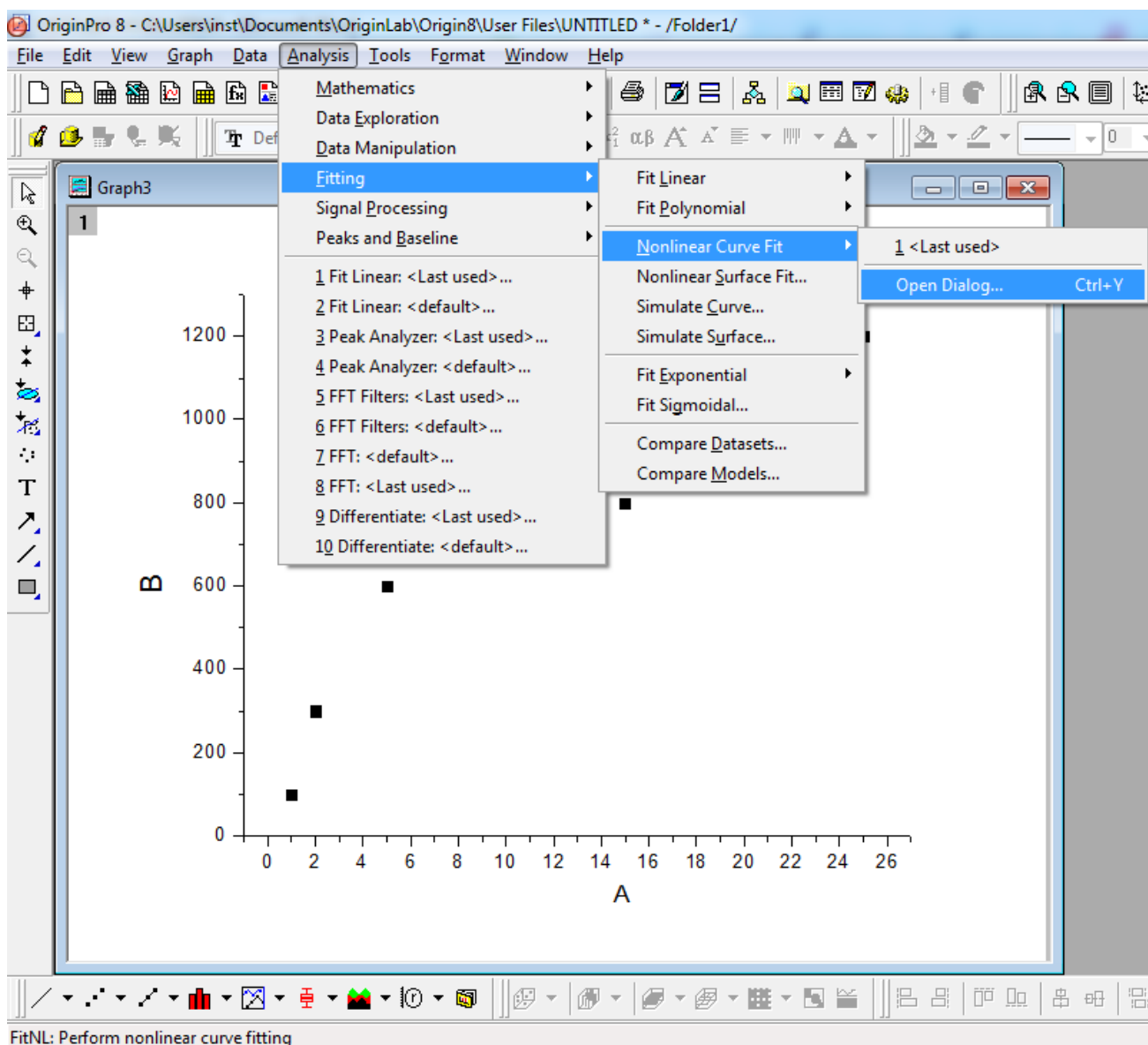
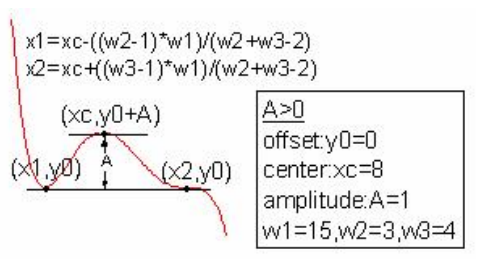


Рисунок 5.5 – Вибір опції нелінійної апроксимації точок на графіку **Nonlinear Curve Fit**.

- бета-функція (**Beta**)

$$y = y_0 + A \left[1 + \left(\frac{W_2 + w_3 - 2}{w_2 - 1} \right) \left(\frac{x - x_c}{w_1} \right) \right]^{w_2 - 1} \left[1 - \left(\frac{w_2 + w_3 - 2}{w_3 - 1} \right) \left(\frac{x - x_c}{w_1} \right) \right]^{w_3 - 1}$$



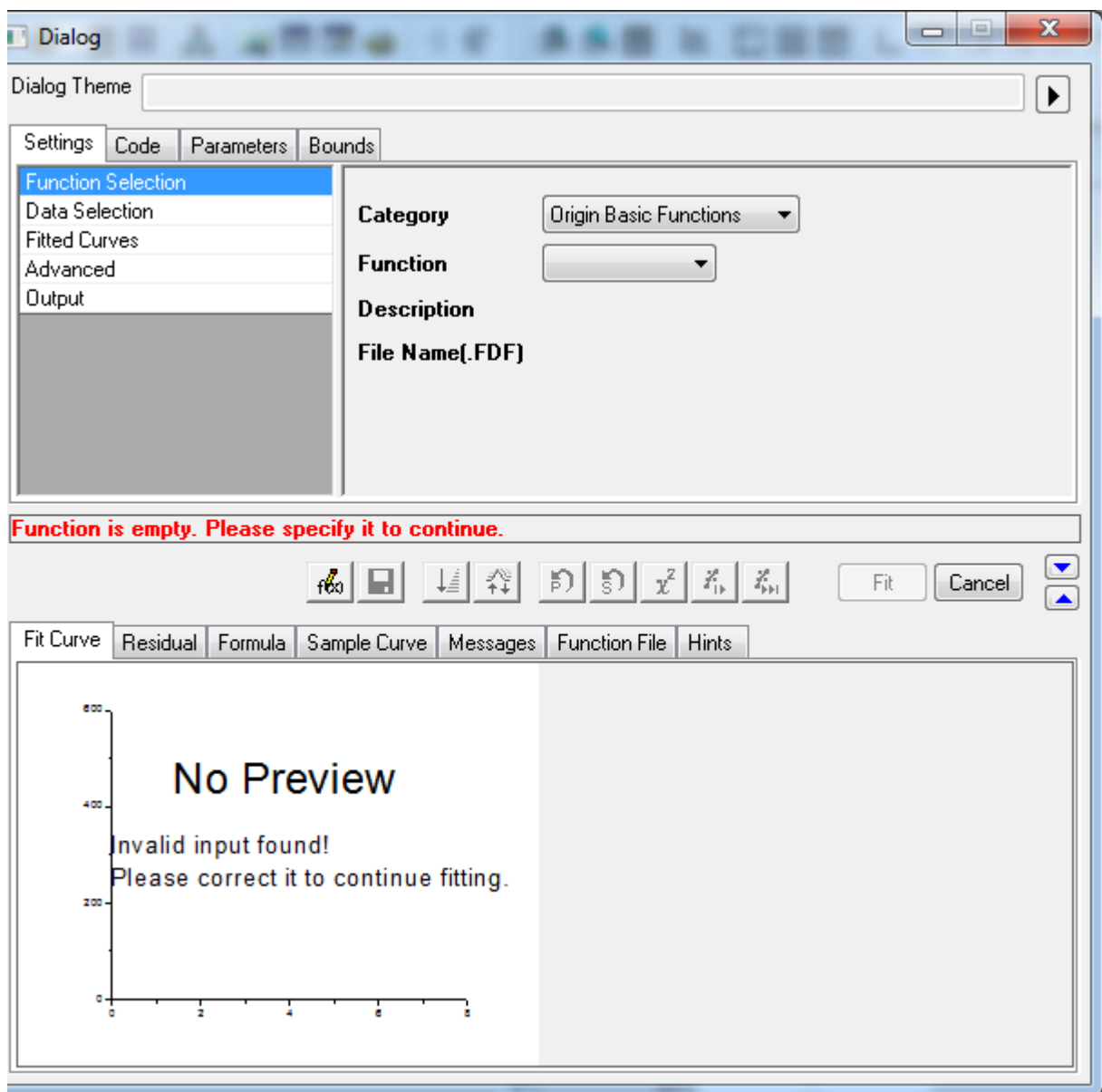
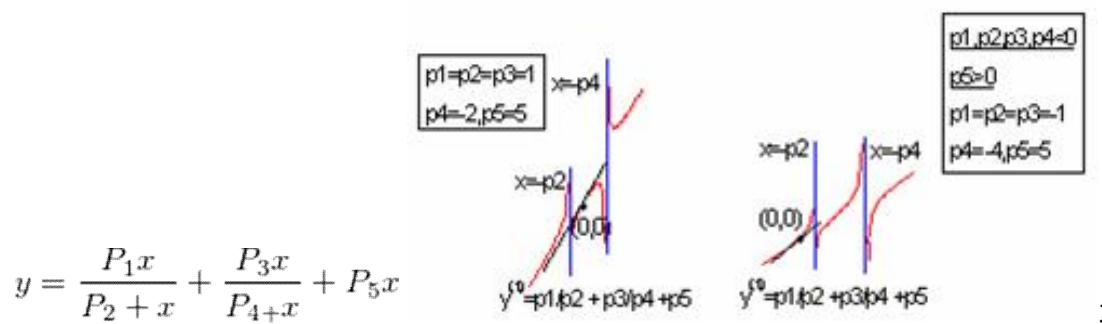
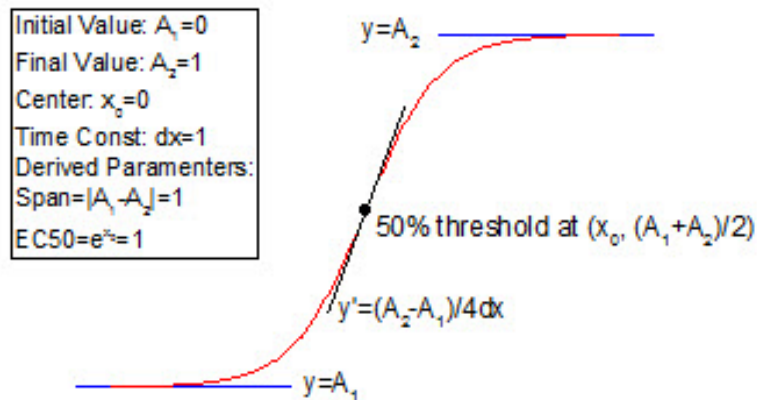


Рисунок 5.6 – Діалогове вікно нелінійної апроксимації **Dialog**.

- подвійна квадратична гіперболічна функція (**Dhyperbl**)

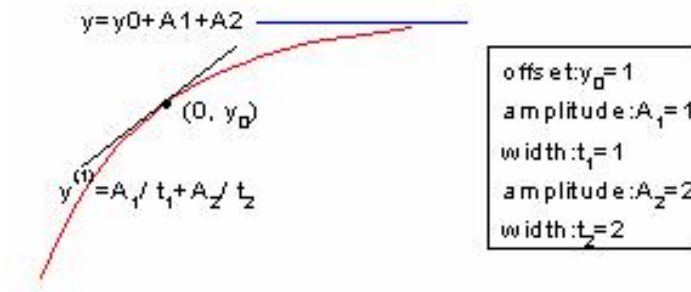


- функція Больцмана (**Bolzm**) $y = \frac{A_1 - A_2}{1 + e^{(x-x_0)/dx}} + A_2$

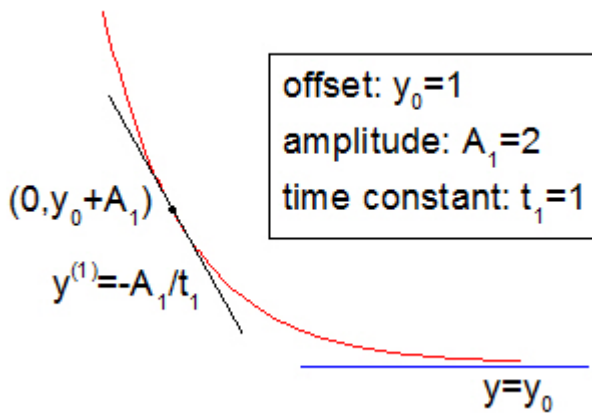


- двухфазна експоненціальна функція (**ExpAssoc**)

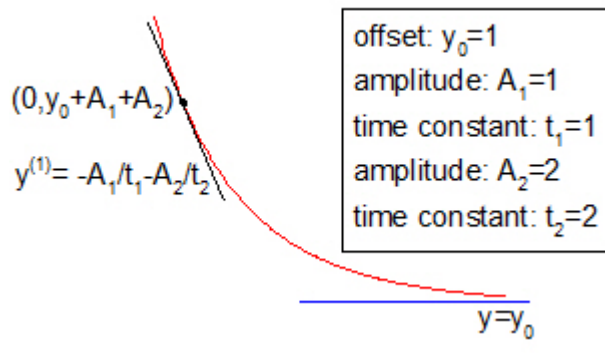
$$y = y_0 + A_1(1 - e^{-x/t_1}) + A_2(1 - e^{-x/t_2})$$



- однофазний експоненціальний спад (**ExpDec1**) $y = y_0 + Ae^{-x/t}$

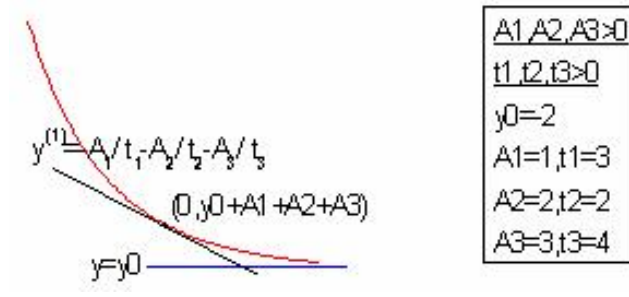


- двухфазный экспоненциальный спад (**ExpDec2**) $y = y_0 + A_1 e^{-x/t_1} + A_2 e^{-x/t_2}$

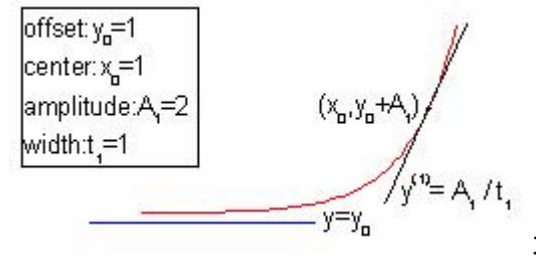


- трехфазный экспоненциальный спад (**ExpDec3**)

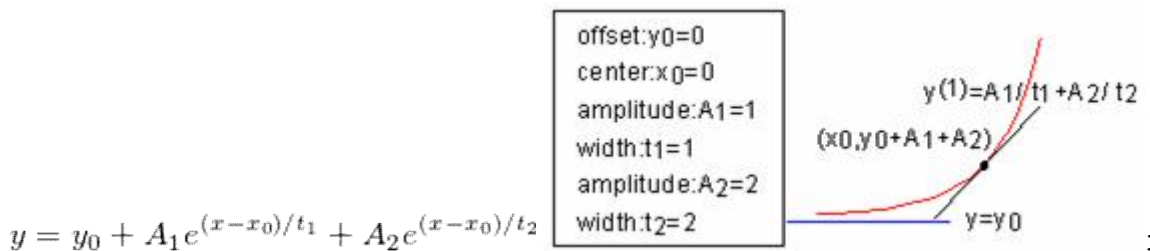
$$y = y_0 + A_1 e^{-x/t_1} + A_2 e^{-x/t_2} + A_3 e^{-x/t_3}$$

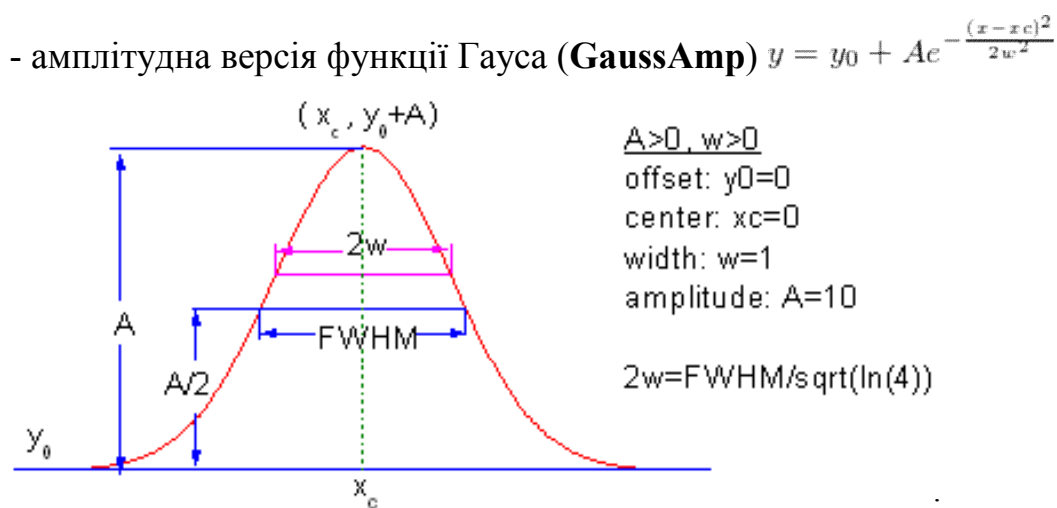
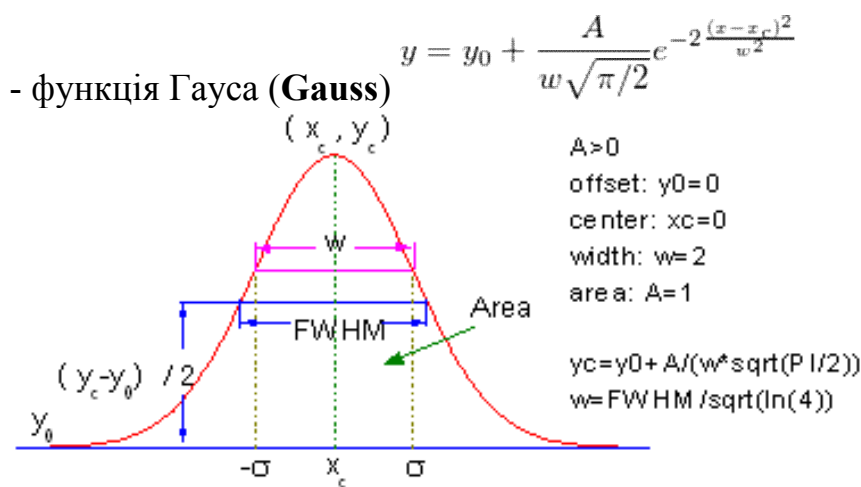


- однофазное экспоненциальное зростання (**ExpGrow1**) $y = y_0 + A_1 e^{(x-x_0)/t_1}$



- двофазне експоненціальне зростання (**ExpGrow2**)

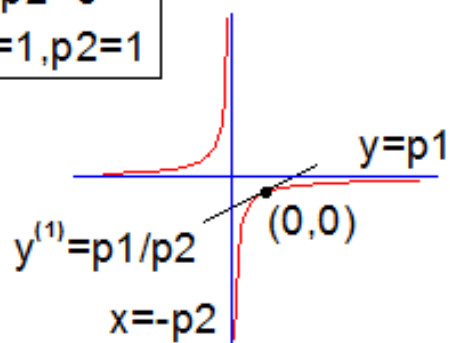




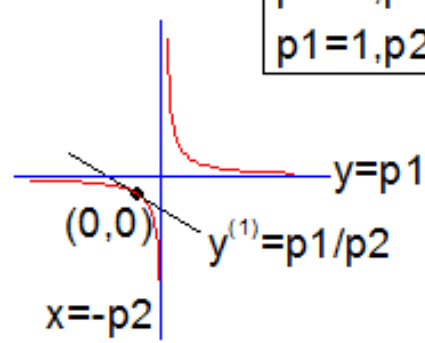
- гіперболічна функція (**Hyperbl**)

$$y = \frac{P_1 x}{P_2 + x}$$

$p_1, p_2 > 0$
 $p_1 = 1, p_2 = 1$

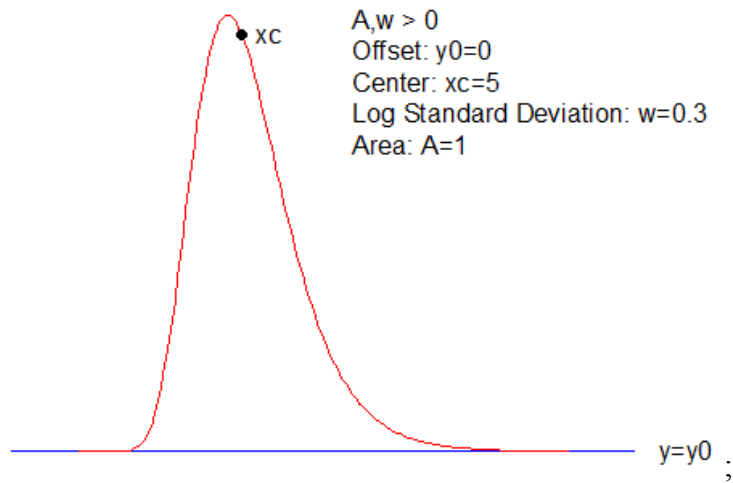


$p_1 > 0, p_2 < 0$
 $p_1 = 1, p_2 = -1$

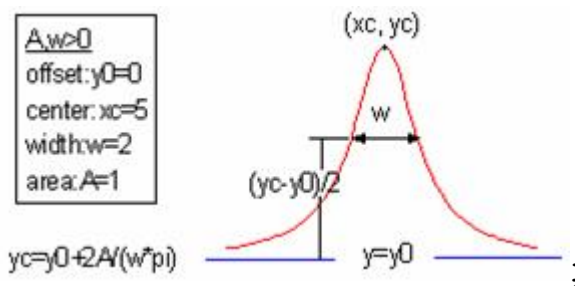


- функція густини ймовірності довільних змінних, у яких логарифм має

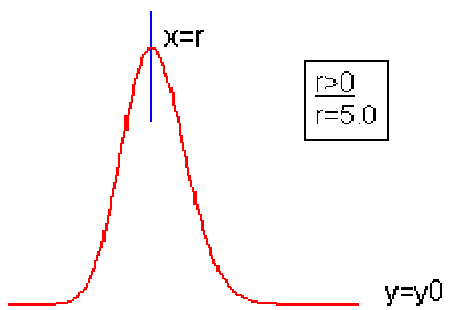
нормальний розподіл (**LogNormal**) $y = y_0 + \frac{A}{\sqrt{2\pi}wx} e^{-\frac{[\ln \frac{x}{x_c}]^2}{2w^2}}$



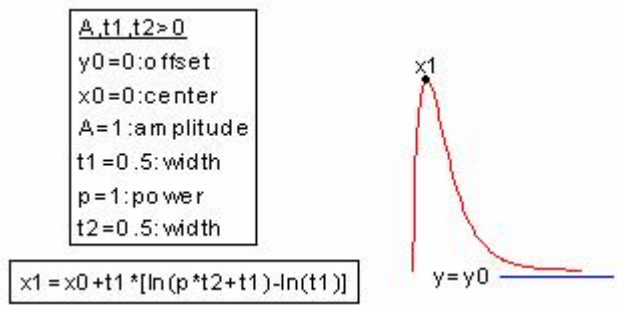
- функція Лоренца (**Lorentz**) $y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \frac{w}{4(x - x_c)^2 + w^2}$



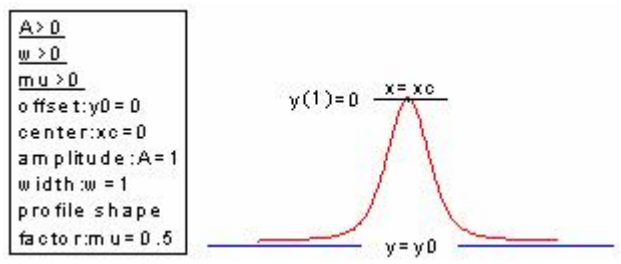
- розподіл Пуассона (**Poisson**) $y = y_0 + \frac{e^{-r} r^x}{x!}$



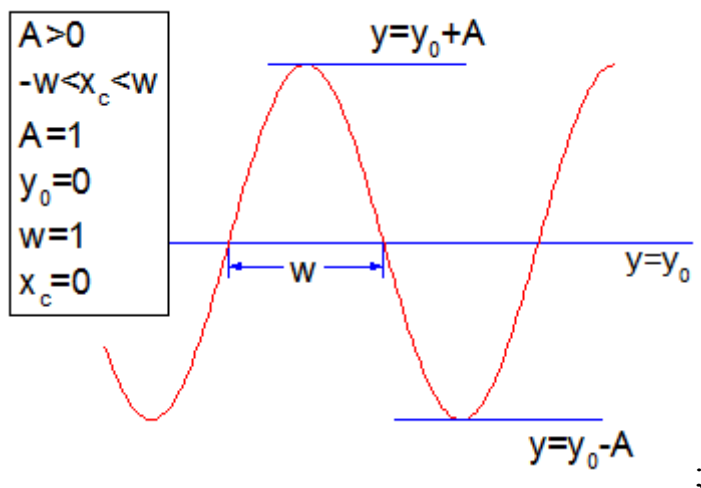
- експоненціальна імпульсна функція (**Pulse**) $y = y_0 + A \left(1 - e^{-\frac{x-x_0}{t_1}}\right)^p e^{-\frac{x-x_0}{t_2}}$



- раціональна функція (**Rational0**) $y = \frac{b + cx}{1 + ax}$

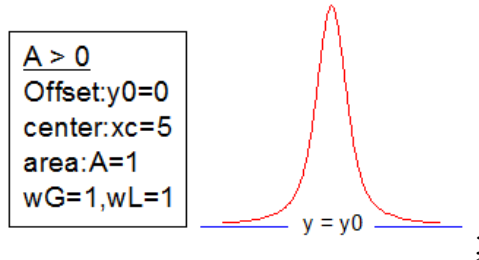


- функція синусоїди (**Sine**) $y = y_0 + A \sin\left(\pi \frac{x - x_c}{w}\right)$



- функція Фойгта (**Voigt**)


$$y = y_0 + A \frac{2 \ln 2}{\pi^{3/2}} \frac{W_L}{W_G^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2}}{\left(\sqrt{\ln 2} \frac{W_L}{W_G}\right)^2 + \left(\sqrt{4 \ln 2} \frac{x-x_c}{W_G} - t\right)^2} dt$$



Наступні пункти **Category** це:

- експоненціальні функції (**Exponential**);
- сигмоїдальні функції (**Growth/Sigmoidal**);
- гіперболічні функції (**Hyperbl**);
- логарифмічні функції (**Logarithm**);
- пікові функції (**Peak Functions**);
- поліноміальні функції (**Polynomial**);
- степеневі функції (**Power**);
- раціональні функції (**Rational**);
- хвильові функції (**Waveform**).

Також є окремі функції для обробки даних хроматографії (**Chromatography**), електрофізіології (**Electrophysiology**), фармакології (**Pharmacology**), спектроскопії (**Spectroscopy**), статистики (**Statistics**).

При виборі функцій у полі **Function** вкладка **Formula** відображає відповідну формулу для даної функції, а вкладка **Sample Curve** показує приклад кривої, що описується даною функцією. Редагувати кожну з функцій або створити власну можна натиснувши на значок  **Create/Edit Fitting Functions** після чого з'явиться діалогове вікно **Fitting Function Organizer**, де можна змінювати стандартні параметри для апроксимації.

Після вибору потрібної функції для апроксимації у діалоговому вікні нелінійної апроксимації **Dialog** потрібно натиснути кнопку **Fit** (Рис. 5.6). Далі на графіку з'явиться апроксимуюча крива та таблиця з даними, використаними для апроксимації (Рис. 5.7).

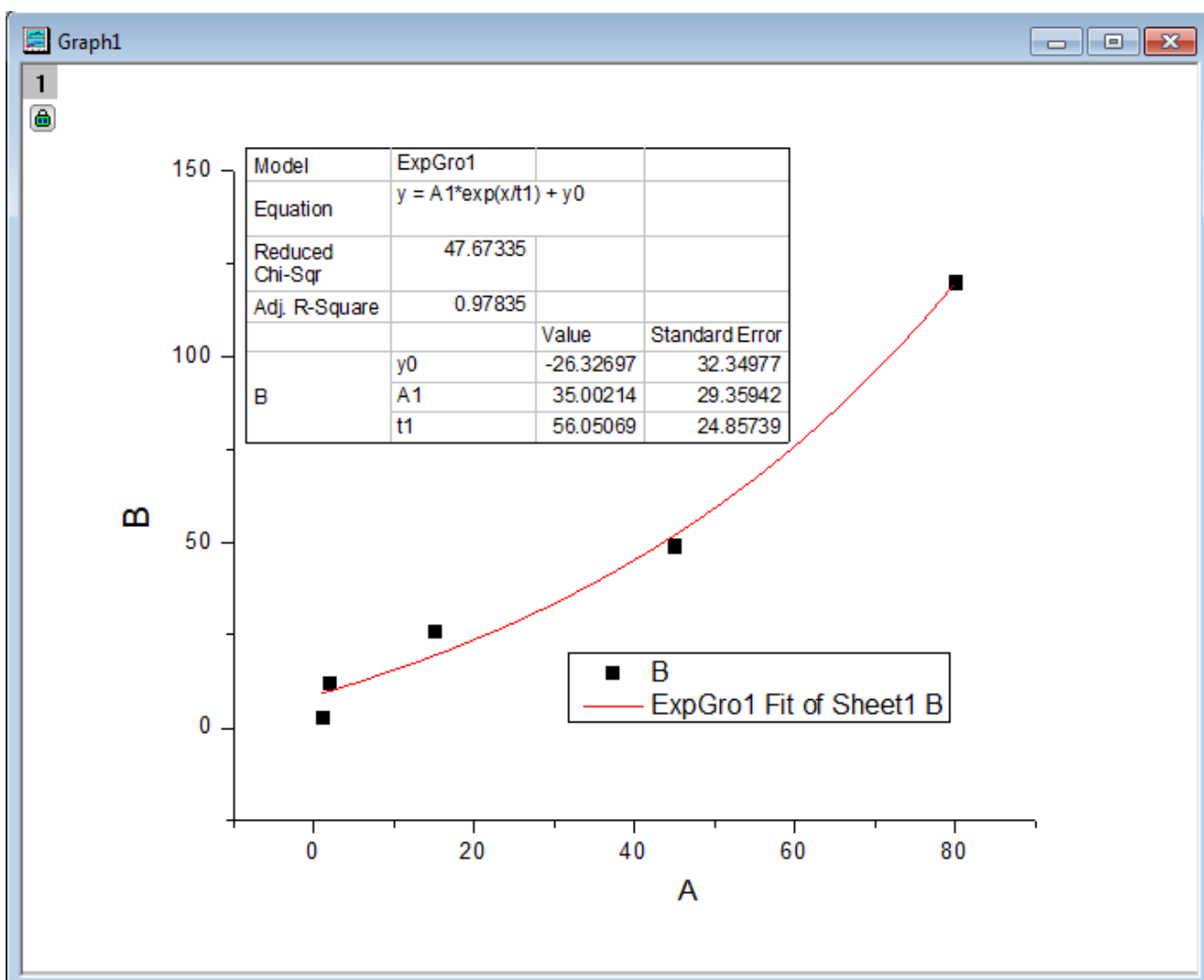


Рисунок 5.7 – Результат нелінійної апроксимації за допомогою опції **Nonlinear Curve Fit**.

Аналіз та обробка графічних даних. Аналіз піків кривих.

Мета роботи: засвоєння основ аналізу графічних даних.

Завдання роботи:

- навчитися видаляти точки на графіку;
- навчитися проводити згладжування кривої на графіку;
- навчитися віднімати базову/фонову лінію спектра на графіку;
- навчитися знаходити піки кривої на графіку;
- проводити процедуру апроксимації піків кривої на графіку.

Теоретичні відомості

Для аналізу графічних даних у програмному середовищі OriginPro використовуються команди з панелі інструментів **Tools** (Рис. 3.19):



– режим вибору об'єкта



– збільшує область на графіку



– зменшує область на графіку



– показує значення координат XY (та Z у разі тривимірного чи контурного графіка) у будь-якій точці на графіку



– показує значення координат XY (та Z у разі тривимірного чи контурного графіка), що відповідають значенням у таблиці даних



– додає текст з даними, що відповідають обраній точці на графіку



– виділяє обрані точки на графіку та відповідні рядки



– визначає діапазон даних



– обирає область на активному графіку



– обирає область на декількох графіках

Видалення точок на графіку

Іноді при аналізі даних на графіку виникає потреба видалити деякі експериментальні точки, які можуть виникнути через похибку експерименту або обладнання, тощо. В такому випадку потрібно побудувати графік по точках, далі обрати в меню **Data** опцію **Remove Bad Data Points...** (Рис. 6.1).

Далі потрібно виділити курсором необхідну точку на графіку (Рис. 6.2) та подвійно натиснути на неї лівою кнопкою миші. Одночасно ця точка зникне зі значень у таблиці даних.

Згладжування кривої на графіку

Зазвичай експериментальні спектри записуються з деяким рівнем шумів, які можна знизити застосовуючи опцію згладжування спектра. Тому для аналізу графічних даних часто треба попередньо провести процедуру згладжування спектра. Для цього після побудови графіка потрібно в меню **Analysis** обрати пункт **Signal Processing** та опцію **Smooth** (Рис. 6.3).

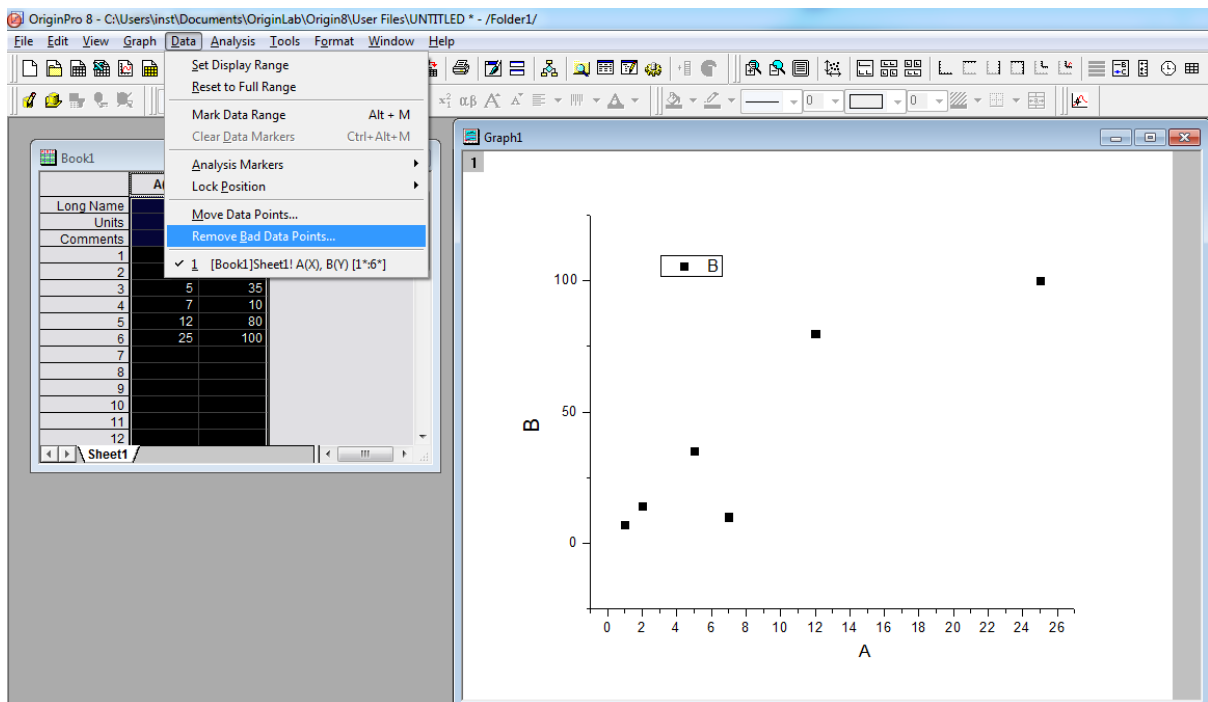


Рисунок 6.1 – Вибір опції **Remove Bad Data Points...**

Далі відкриється діалогове вікно **Signal Processing: smooth** (Рис. 6.4). У цьому вікні є можливість вибору методу згладжування (**Method**): **Adjacent Averaging**, **Savitzky-Golay**, **Percentile Filtering**, **FFT filtering**. Для покращення результату згладжування можна збільшити значення **Points of Window**.

Метод усереднення за декількома точками або суміжного усереднення (**Adjacent Averaging**) бере середнє значення кількості точок даних, задане користувачем, навколо кожної точки на графіку, та замінює цю точку на нове середнє значення.

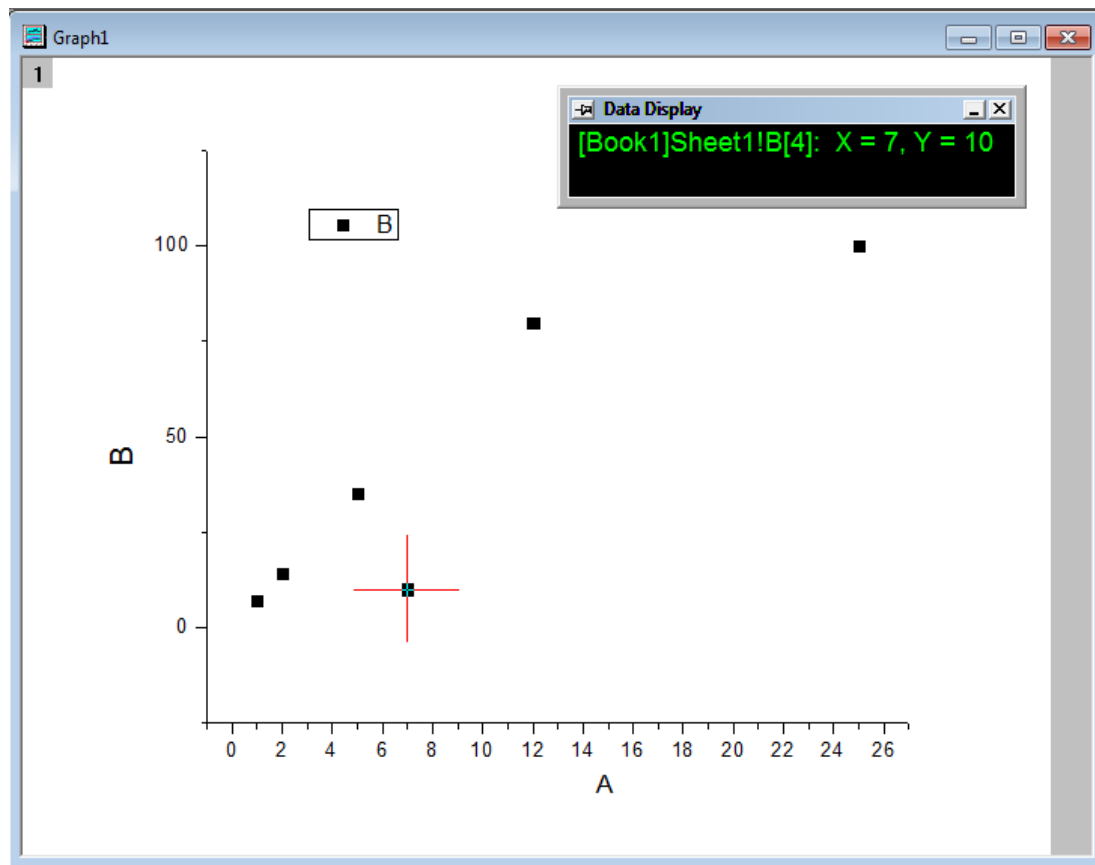


Рисунок 6.2 – Процедура видалення точки на графіку за допомогою опції **Remove Bad Data Points...**

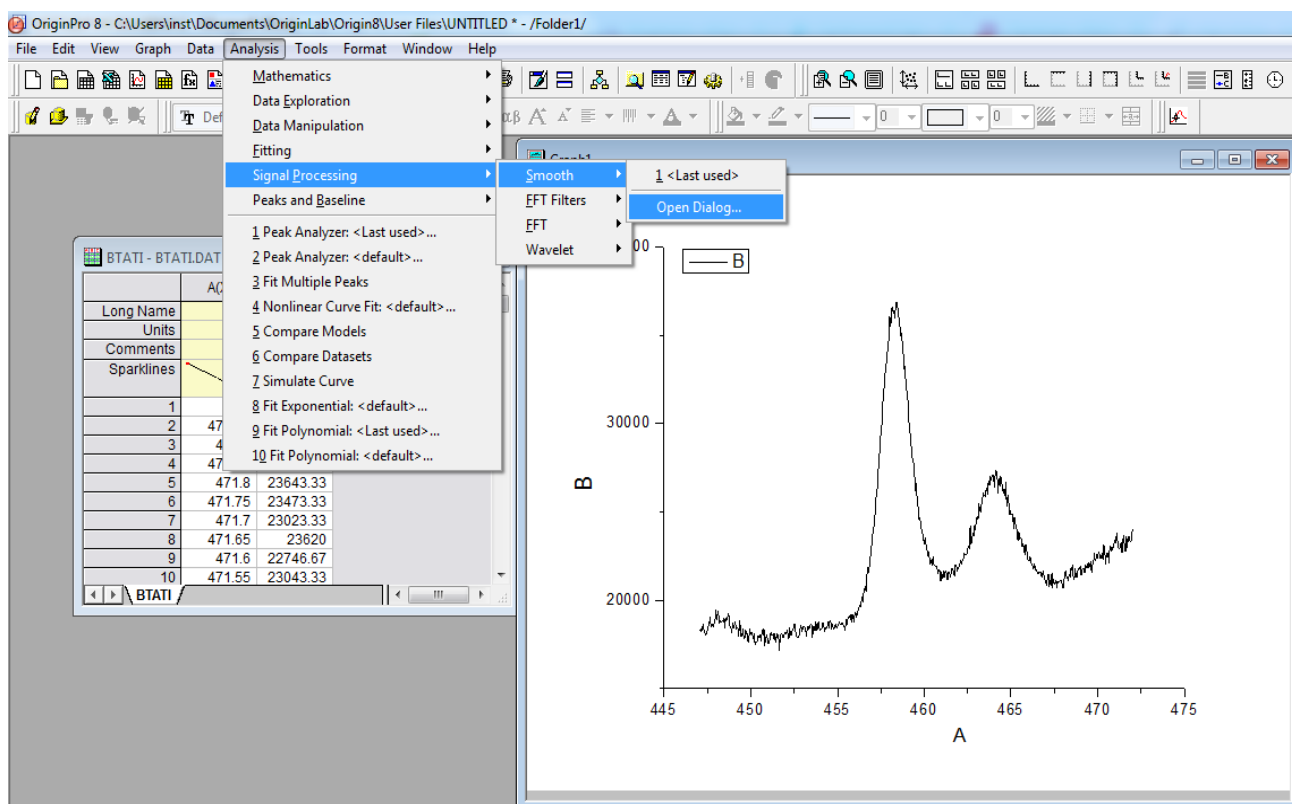


Рисунок 6.3 – Вибір опції **Smooth** для згладжування кривих.

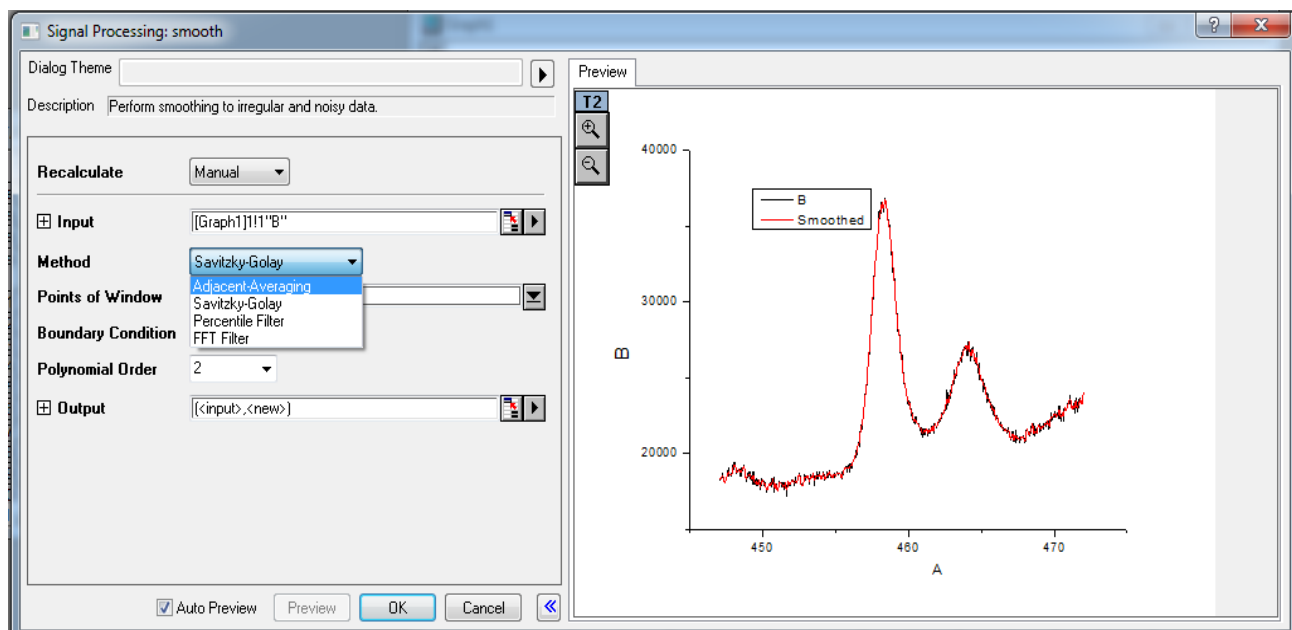


Рисунок 6.4 – Діалогове вікно **Signal Processing: smooth** для згладжування кривих.

Метод фільтрації Савицького-Голя (Savitzky-Golay), який ще називають поліноміальним згладжуючим фільтром або згладжуючим фільтром з мінімальною квадратичною похибкою, являє собою локальну поліноміальну регресію навколо кожної точки, що створює нове, згладжене значення для кожної точки даних. Цей метод має перевагу над методом усереднення за декількома точками, оскільки він намагається зберегти такі дані, як висота та ширина піків. Отже, якщо крива містить нормально розподілений шум, то зазвичай застосовують методи **Adjacent Averaging** або **Savitzky-Golay**.

У випадку так званого дробового шуму, що виникає через невпорядковані флуктуації напруг та струмів відносно їх середнього значення у ланцюгах електричних та електронних пристроїв, що обумовлені дискретністю носіїв електричного заряду, найкраще застосовувати метод медіанного фільтра (**Percentile Filtering**) зі значенням **Percentile 50%**. Медіанний фільтр є нелінійним фільтром з кінцевою імпульсною характеристикою він є ефективним для обробки сигналів, що піддаються впливу імпульсних перешкод.

У випадку високочастотних шумів застосовується метод фільтрації Фур'є або швидкого перетворення Фур'є (**FFT filtering**), який видаляє високочастотний шум, залишаючи реальний сигнал.

Аналіз піків кривої на графіку

Для аналізу піків на графіку потрібно обрати в меню **Analysis** підпункт **Peaks and Baseline** та опцію **Peak Analyser** (Рис. 6.5). Далі відкриється діалогове вікно **Peak Analyser** (Рис. 6.6).

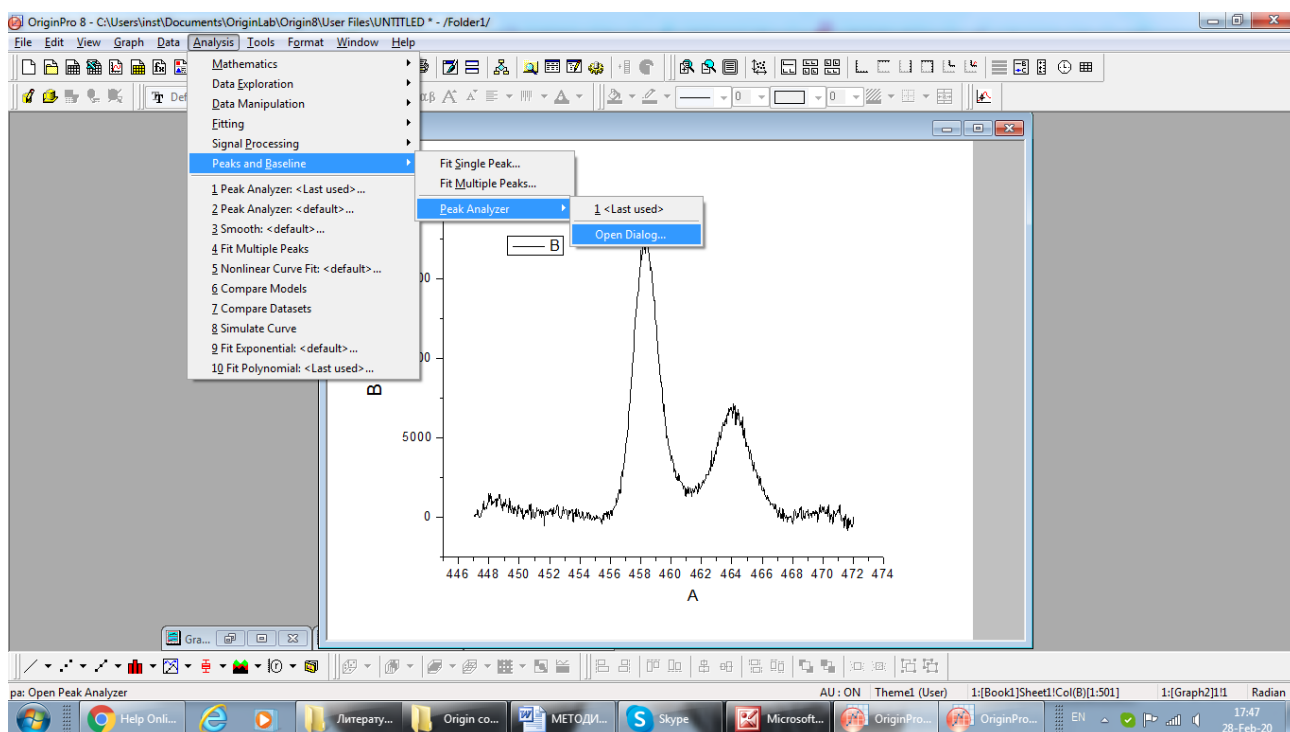


Рисунок 6.5 – Вибір опції **Peak Analyser** для аналізу піків на графіку.

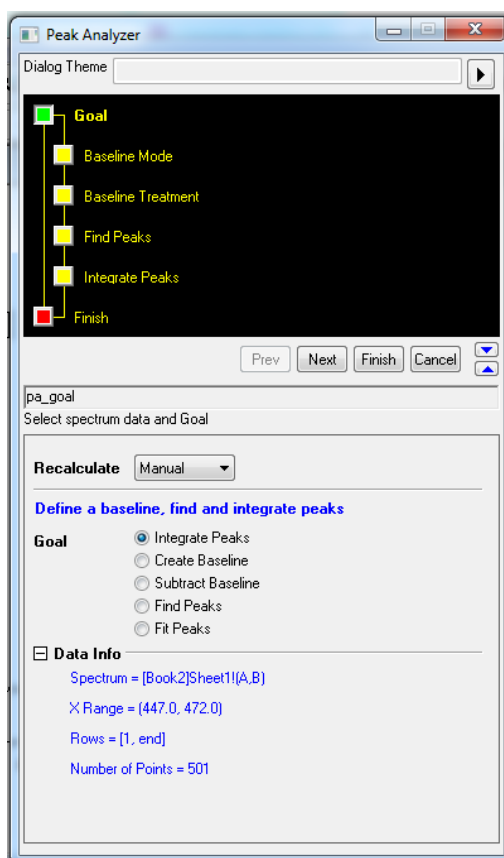


Рисунок 6.6 – Діалогове вікно **Peak Analyser** для аналізу піків на графіку.

Можливі дії, які можна виконати, використовуючи діалогове вікно **Peak Analyser** позначені в пункті **Goal** – це: визначення (**Create Baseline**) та віднімання базової/фонової лінії (**Subtract Baseline**), пошук (**Find Peaks**), інтегрування (**Integrate Peaks**) та апроксимації піків (**Fit Peaks**). Для вибору відповідної дії треба обрати її та натиснути кнопку **Next**.

Розглянемо режим віднімання базової/фонової лінії (**Subtract Baseline**). Наступне вікно, яке відкриється, надає можливість задавати параметри базової/фонової лінії для віднімання (Рис. 6.7).

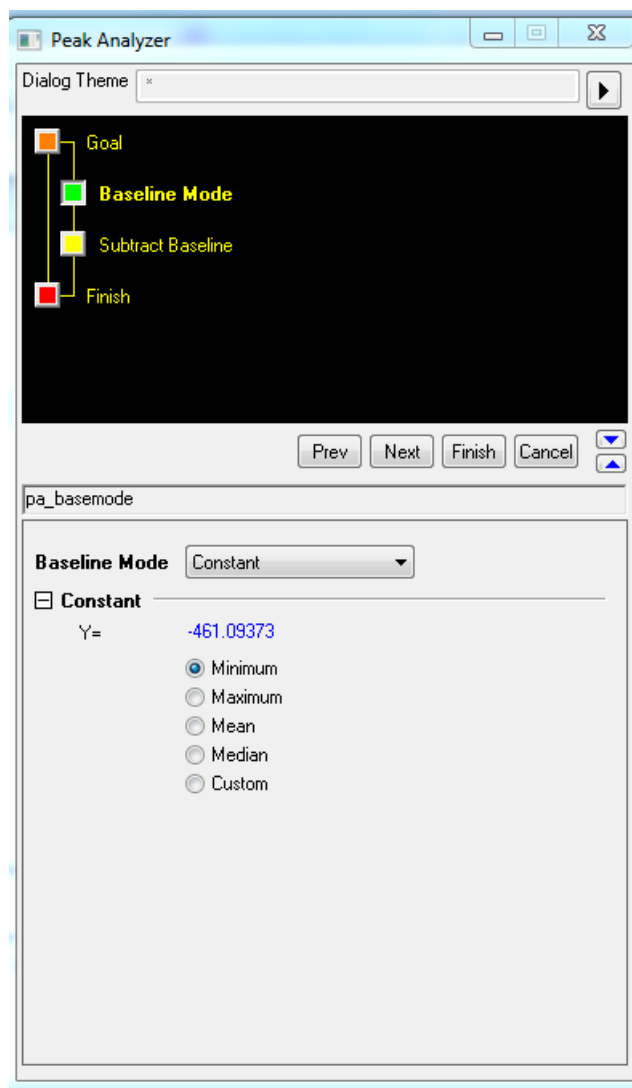


Рисунок 6.7 – Діалогове вікно **Peak Analyser** у режимі визначення параметрів базової/фонової лінії.

Параметри базової/фонової лінії для віднімання задаються у **Baseline mode**.

Перший пункт параметрів у **Baseline mode** це **Constant** – використовує статистичні значення або задані значення у якості сталої базової/фонової лінії: мінімальне (**Minimum**), максимальне (**Maximum**), середнє (**Mean**), медіанне значення (**Median**), задане значення (**Custom**).

Наступний пункт параметрів у **Baseline mode** це **User Defined** – дозволяє створювати базову/фонову лінію користувача. Якщо обрано пункт **Enable Auto Find** відбувається автоматичний пошук точок для базової/фонової лінії, якщо цей пункт неактивний, то можна задати кількість точок вручну та позначити їх на графіку самостійно.

Наступний пункт параметрів у **Baseline mode** це **Use Existing Dataset** дозволяє використовувати заданий набір даних у якості базової/фонової лінії.

Останній пункт параметрів у **Baseline mode** це **XPS** – використовується для базової/фонової лінії для спектрів рентгенівської фотоелектронної спектроскопії.

Після вибору потрібної опції для базової/фонової лінії натискаємо кнопку **Next**. Відкриється вкладка для задавання параметрів збереження даних після віднімання базової/фонової лінії. Після натиснення кнопок **Subtract** та **Finish** на графіку з'являється відкоректований спектр після віднімання базової/фонової лінії.

Режим знаходження піків на кривій обирається в діалоговому вікні **Peak Analyser** в пункті **Goal** як **Find peaks**. Після вибору опції **Find peaks** та натиснення кнопки **Next** з'являється діалогові вікна **Baseline mode** та **Baseline treatment**, описані вище. Після віднімання базової/фонової лінії програма переходить безпосередньо до діалогового вікна **Find peaks** (Рис. 6.8). Вибір опції **Enable Auto Find** дозволяє автоматичний пошук піків на кривій. В пункті **Peak Finding Settings** можна налаштовувати параметри пошуку піків на кривій.

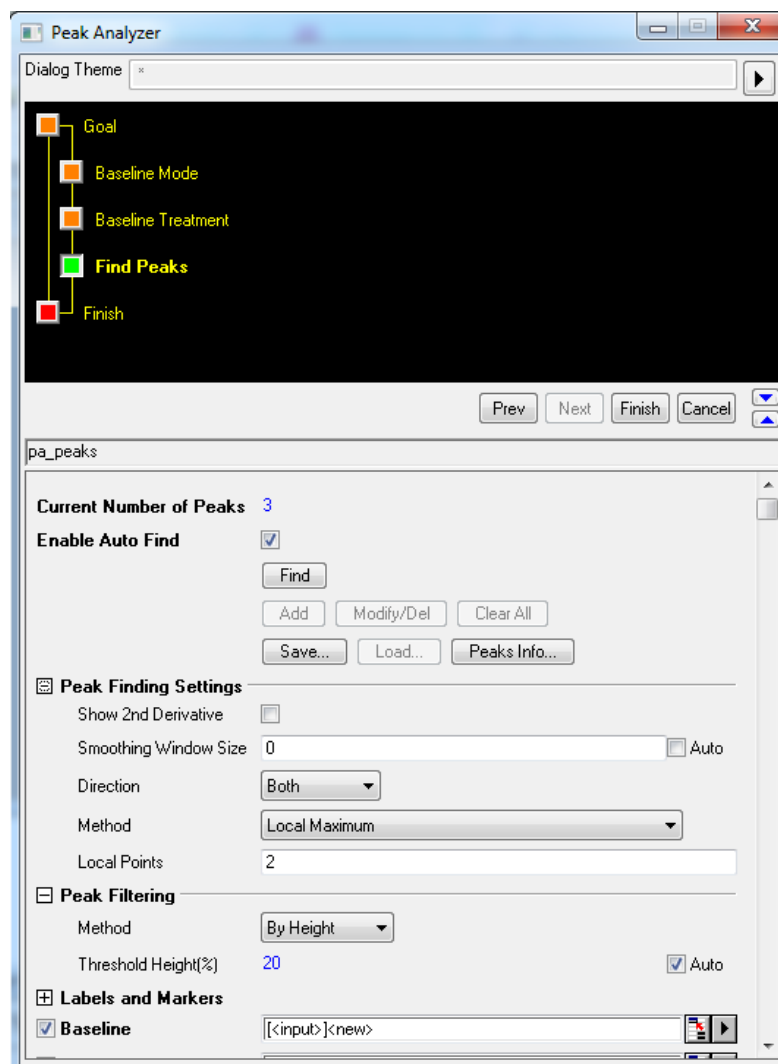


Рисунок 6.8 – Режим пошуку піків на кривій за допомогою опції **Find peaks** діалогового вікна **Peak Analyser**.

Зокрема можна обрати методи пошуку **Method**:

Local Maximum – порівнює найближчі N сусідів та знаходить максимум

Window Search – знаходить максимальне значення у заданому вікні пошуку. Вікно може бути задано в абсолютному значенні або процентному значенні відповідно до загальної ширини та максимуму висоти.

First Derivative – знаходить значення де перша похідна дорівнює 0. Пропонує опції згладжування вихідних даних до обрахування першої похідної для точного пошуку положення піків.

Second Derivative – знаходить сховані піки, визначаючи локальні екстремуми необроблених/згладжених даних

Residual after 1st Derivative – обраховує різниці між спектральними даними та зведеними даними апроксимації та знаходить сховані піки, визначаючи різниці, які є більшими ніж деякий поріг.

Також можна фільтрувати знайдені піки за числом піків або за висотою піків в пункті **Peak Filtering** наступними опціями:

By Height – відфільтровує піки з висотою піків, меншою ніж порогове значення, вказане в пункті **Threshold Height(%)**;

By Number – обмежує кількість піків, яку потрібно знайти.

Додатково можна додавати або видаляти піки за допомогою кнопок **Add** та **Modify/Del**, відповідно.

Після вибору всіх потрібних параметрів потрібно натиснути **Finish**. В результаті отримаємо графік, показаний на Рис. 6.9.

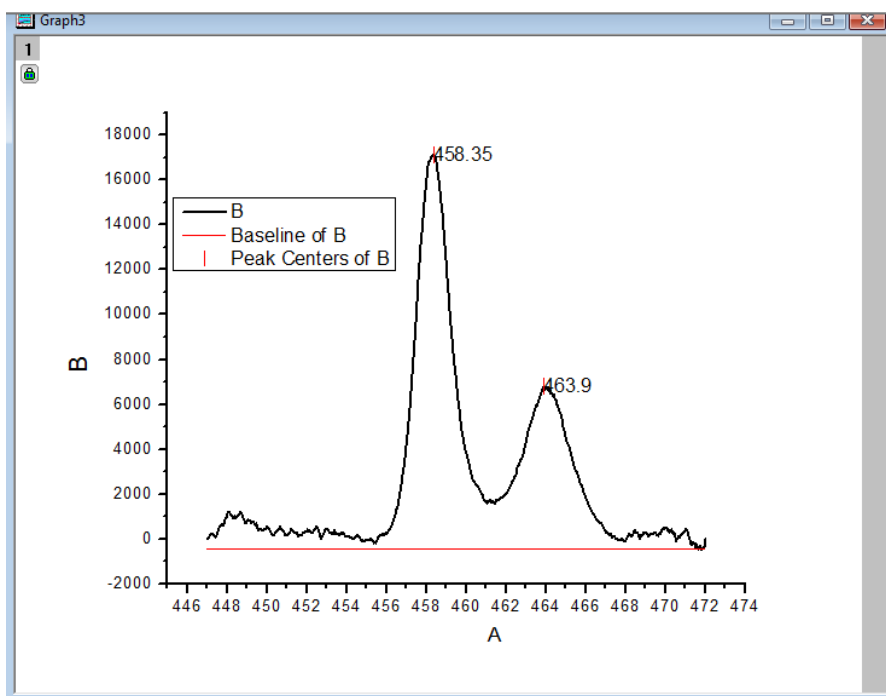


Рисунок 6.9 – Результат пошуку піків на спектрі із застосуванням опції **Find peaks**.

Якщо потрібно провести процедуру апроксимації піків потрібно обрати опцію **Fit Peaks** в діалоговому вікні **Peak Analyser** в пункті **Goal** та натиснути **Next**. Далі буде проведено процедуру коректування базової/фонової лінії та пошуку піків, як було описано вище, і потім програма переходить безпосередньо до процедури апроксимації піків **Fit Peaks** (Рис. 6.10).

Для контролю параметрів апроксимації піків потрібно натиснути кнопку **Fit Control** в діалоговому вікні **Peak Analyser** в режимі **Fit Peaks**, далі відкриється діалогове вікно контролю параметрів апроксимації піків **Peak Fit Parameters** (Рис. 6.11).

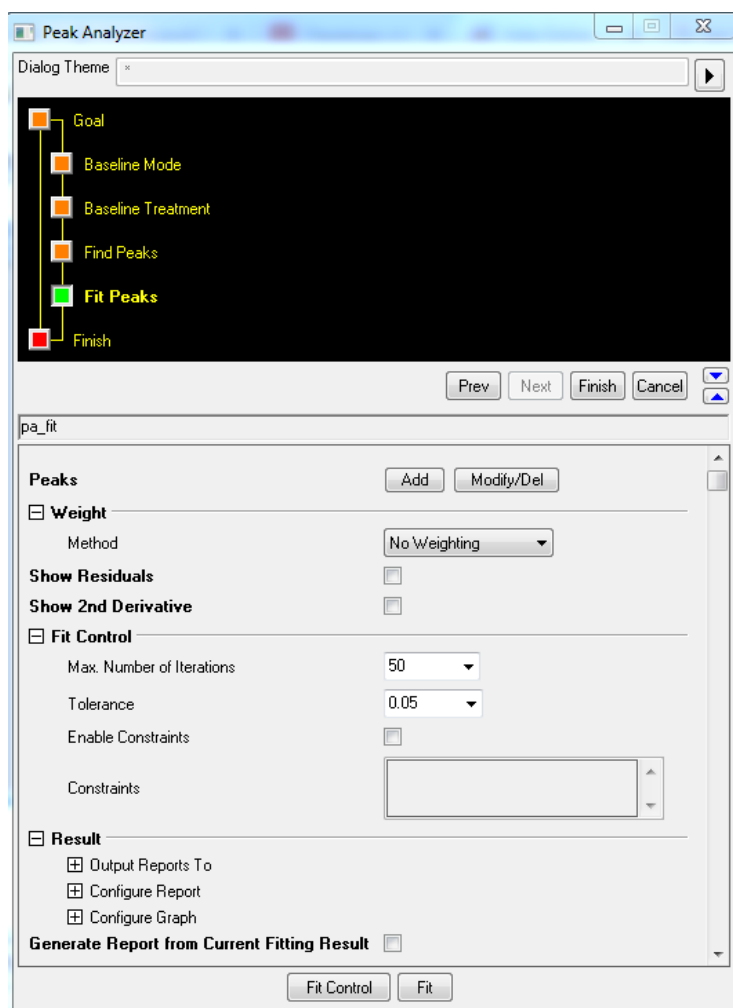


Рисунок 6.10 – Режим апроксимації піків на кривій за допомогою опції **Fit Peaks** діалогового вікна **Peak Analyser**.

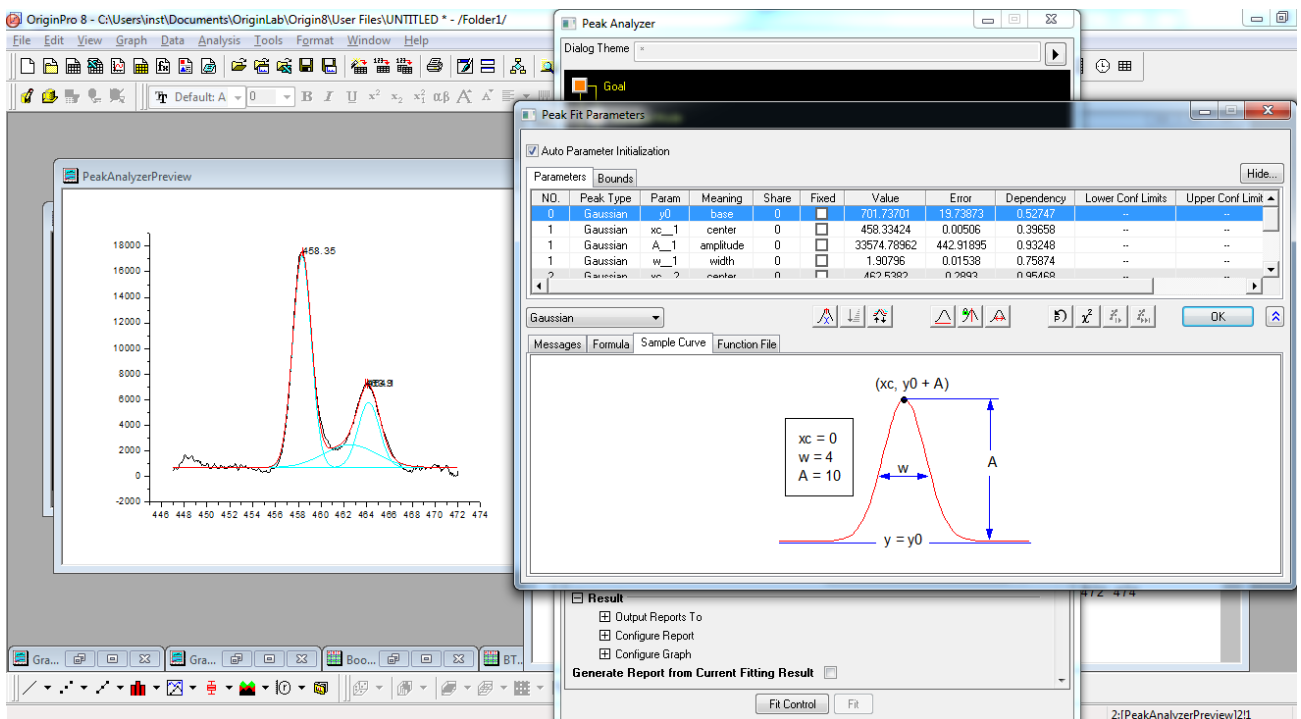
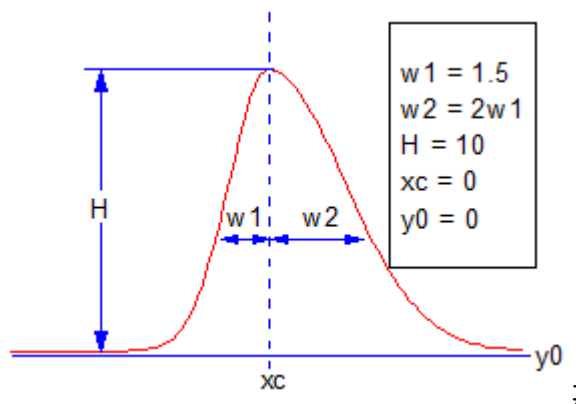


Рисунок 6.11 – Діалогове вікно контролю параметрів апроксимації піків **Peak Fit Parameters** та приклад апроксимації за допомогою Гаусової функції (**Gaussian**).

Апроксимувати спектри можна за допомогою:

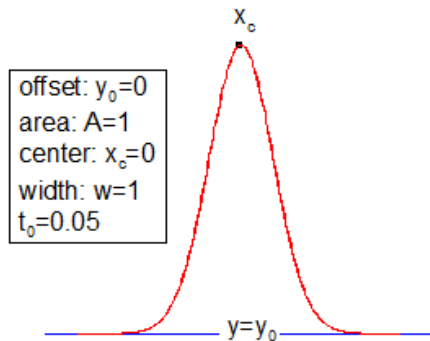
- функції Гауса (**Gaussian**) (див. Розділ 5);
- амплітудної версії функції Гауса (**GaussAmp**) (див. Розділ 5);
- подвійної функції Гауса (**Bigaussian**) $y = y_0 + H e^{-0.5 \cdot (\frac{x - x_c}{w_1})^2} (x < x_c)$,
 $y = y_0 + H e^{-0.5 \cdot (\frac{x - x_c}{w_2})^2} (x \geq x_c)$



- експоненційно-модифікованої функції Гауса для пікових значень (**GaussMod**), яку зазвичай використовують в хроматографії:

$$f(x) = y_0 + (f_1 * f_2)(x) = y_0 + \frac{A}{t_0} e^{\frac{1}{2}(\frac{w}{t_0})^2 - \frac{x-x_c}{t_0}} \int_{-\infty}^z \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y^2}{2}} dy, \quad \text{де}$$

$$f_1(x) = \frac{A}{t_0} e^{-\frac{x}{t_0}} \quad \text{та} \quad f_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}w} e^{-\frac{(x-x_c)^2}{2w^2}}, \quad z = \frac{x-x_c}{w} - \frac{w}{t_0}$$



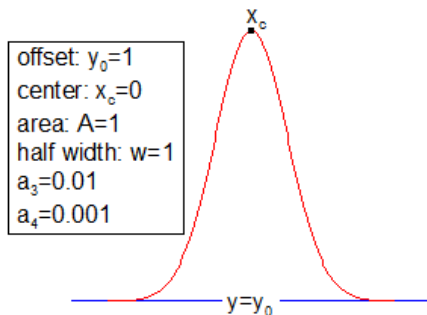
;

- функції пікових значень Грама-Шарл'є (**GCAS**), що використовується в

хроматографії:

$$f(z) = y_0 + \frac{A}{w\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{z^2}{2}} \left(1 + \left| \sum_{i=3}^4 \frac{a_i}{i!} H_i(z) \right| \right), \quad z = \frac{x-x_c}{w},$$

$$H_3 = z^3 - 3z, \quad H_4 = z^4 - 6z^2 + 3$$



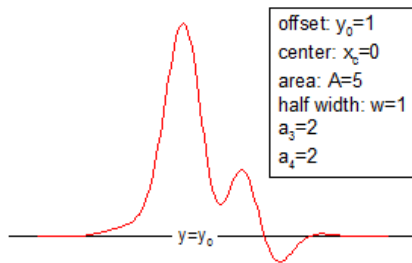
;

- функції Лоренца (**Lorentz**) (див. Розділ 5);
- функції густини ймовірності довільних змінних, у яких логарифм має нормальний розподіл (**LogNormal**) (див. Розділ 5);
- функції Фойгта (**Voigt**) (див. Розділ 5);
- функції синусоїди (**Sine**) (див. Розділ 5);

- функції пікових значень Еджвот-Крамера (**ECS**), що використовується в хроматографії:

$$y = y_0 + \frac{A}{w\sqrt{2\pi}} \left\{ e^{-0.5z^2} \left(1 + \frac{a_3}{3!} z(z^2 - 3) + \frac{a_4}{4!} (z^4 - 6z^3 + 3) + \frac{10a_3^2}{6!} (z^6 - 15z^4 + 45z^2 - 15) \right) \right\},$$

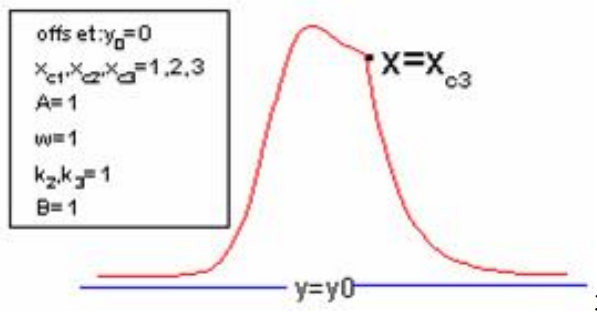
$$\text{де } z = \frac{x - x_c}{w}$$



;

- функції пікових значень Чеслера-Крама (**CSE**), що використовується в хроматографії:

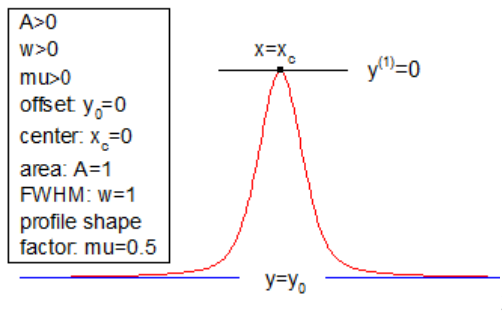
$$y = y_0 + A \left[e^{-\frac{(x-x_{c1})^2}{2w}} + B(1 - 0.5(1 - \tanh(k_2(x-x_{c2})))) e^{-0.5k_3(|x-x_{c3}| + (x-x_{c3}))} \right]$$



;

- функції псевдо-Фойгта (**PsdVoigt1**), що являє собою лінійну комбінацію функцій Гауса та Лоренца:

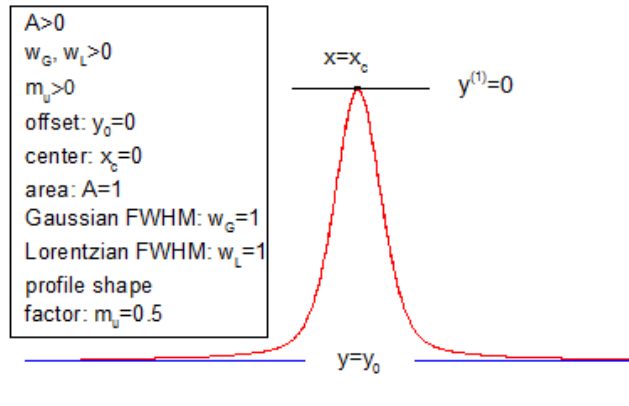
$$y = y_0 + A \left[m_u \frac{2}{\pi} \frac{w}{4(x-x_c)^2 + w^2} + (1 - m_u) \frac{\sqrt{4 \ln 2}}{\sqrt{\pi} w} e^{-\frac{4 \ln 2}{w^2} (x-x_c)^2} \right]$$



;

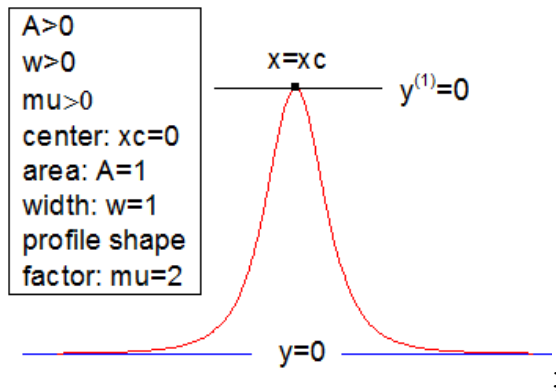
- функції псевдо-Фойгта (**PsdVoigt2**), що являє собою лінійну комбінацію функцій Гауса та Лоренца з різною повною шириною на рівні половинної амплітуди (FWHM):

$$y = y_0 + A \left[m_u \frac{2}{\pi} \frac{w_L}{4(x - x_c)^2 + w_L^2} + (1 - m_u) \frac{\sqrt{4 \ln 2}}{\sqrt{\pi} w_G} e^{-\frac{4 \ln 2}{w_G^2} (x - x_c)^2} \right]$$



- функції пікових значень Пірсона VII типу (**PearsonVII**), що являє собою функцію Лоренца, піднесену до степеня:

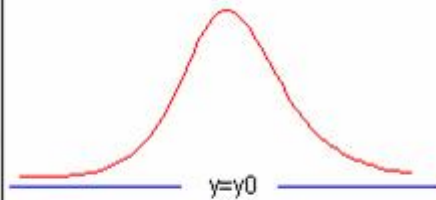
$$y = y_0 + A \frac{2\Gamma(\mu)\sqrt{2^{1/\mu}-1}}{\sqrt{\pi}\Gamma(\mu-\frac{1}{2})w} \left[1 + 4 \frac{2^{1/\mu}-1}{w^2} (x - x_c)^2 \right]^{-\mu}$$



- асиметричної подвійної сигмоїдальної функції (**Asym2Sig**):

$$y = y_0 + A \frac{1}{1 + e^{-\frac{x - x_c + w_1/2}{w_2}}} \left(1 - \frac{1}{1 + e^{-\frac{x - x_c - w_1/2}{w_3}}} \right)$$

A>0
w1,w2,w3>0
 offset:y0=0
 center:xc=0
 amplitude:A=1
 width:w1=1
 width:w2=2
 width:w3=3

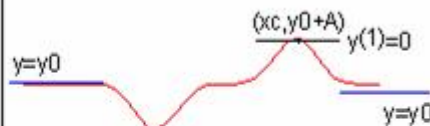


;

- амплітудної версії функції пікових значень Вейбула (**Weibull3**):

$$S = \frac{x - x_c}{w_1} + \left(\frac{w_2 - 1}{w_2} \right)^{\frac{1}{w_2}}, \quad y = y_0 + A \left(\frac{w_2 - 1}{w_2} \right)^{\frac{1 - w_2}{w_2}} [S]^{w_2 - 1} e^{-[S]^{w_2} + \left(\frac{w_2 - 1}{w_2} \right)}$$

A>0
w1>0
w2>2
Mod(w2,2)=0
 xc=5
 A=1
 w1=2
 w2=4



;

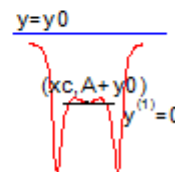
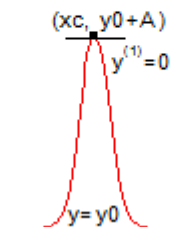
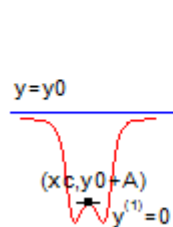
- оберненої поліноміальної функції з центром (**InvsPoly**):

$$y = y_0 + \frac{A}{1 + A_1 \left(2 \frac{x - x_c}{w} \right)^2 + A_2 \left(2 \frac{x - x_c}{w} \right)^4 + A_3 \left(2 \frac{x - x_c}{w} \right)^6}$$

A2>0, w>0
A<0, A1<0
 y0=0, xc=1, w=5
 A=-1, A1=-1
 A2=1, A3=1

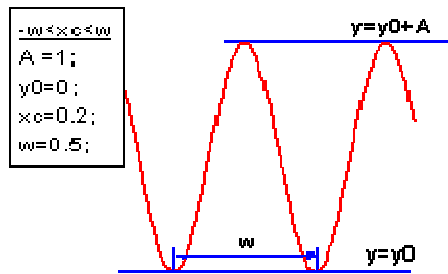
w>0, A>0
A2*A2-3*A1*A3<0
 y0=0, xc=1, w=5
 A=1, A1=1
 A2=1, A3=1

A<0, A2<0
A1>0, A3>0
A2^2-3*A1*A3>0
 y0=0, xc=1, w=5
 A=-1, A1=1
 A2=-3, A3=7/3



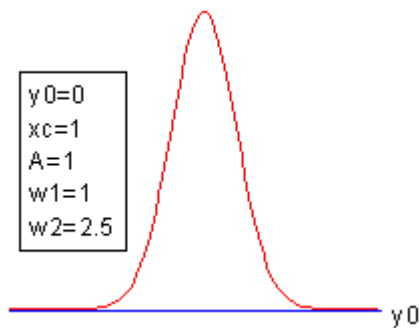
;

- функції квадрата синусоїди (**SineSqr**): $y = y_0 + A \sin^2 \left(\pi \frac{x - x_c}{w} \right)$



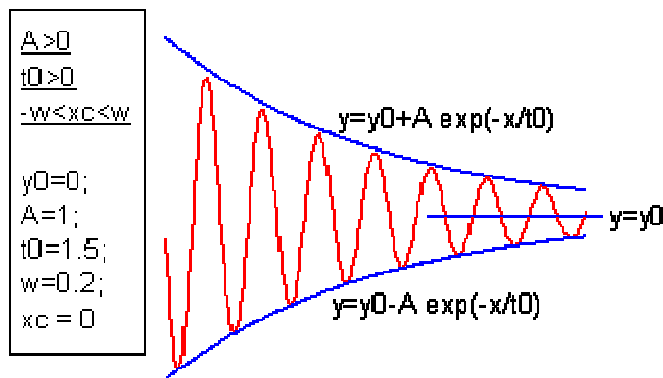
;

- обмеженої функції Гауса (**ConsGaussian**): $y = y_0 + \frac{A e^{-\frac{0.5(x-x_c)^2}{(w_1+w_2x_c)^2}}}{(w_1 + w_2x_c) \sqrt{2\pi}}$



- функції згасаючої синусоїди (**SineDamp**), що являє собою синусоїдальну функцію, чия амплітуда спадає із збільшенням часу:

$$y = y_0 + A e^{\frac{-x}{t_0}} \sin \left(\pi \frac{x - x_c}{w} \right), A > 0, t_0 > 0, w > 0$$

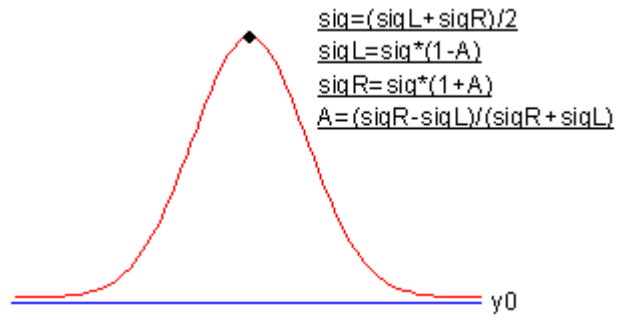


;

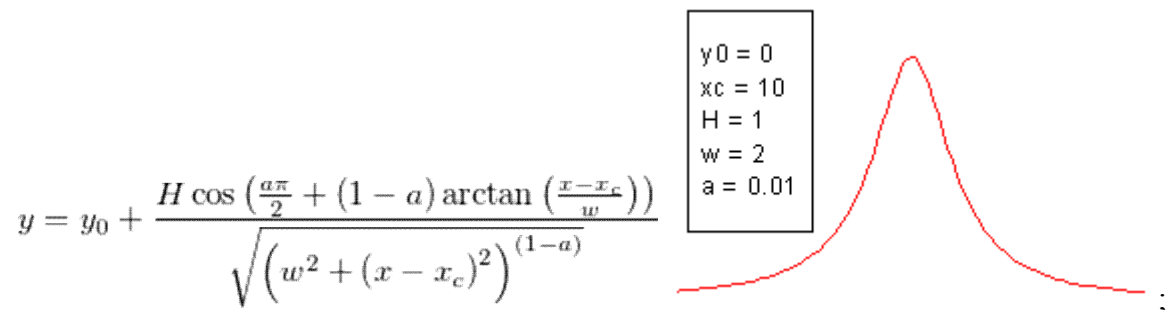
- експоненціальної імпульсної функції (**Pulse**) (див. Розділ 5);

- функції Фразера-Судзуки (**FraserSuzuki**): $y = y_0 + \frac{Ae^{-\frac{(x-x_c)^2}{2sigL}}}{sig\sqrt{2\pi}} (x < 0),$

$$y = y_0 + \frac{Ae^{-\frac{(x-x_c)^2}{2sigR}}}{sig\sqrt{2\pi}} (x \geq 0), \text{ де } sigL = sig(1 - A), sigR = sig(1 + A)$$

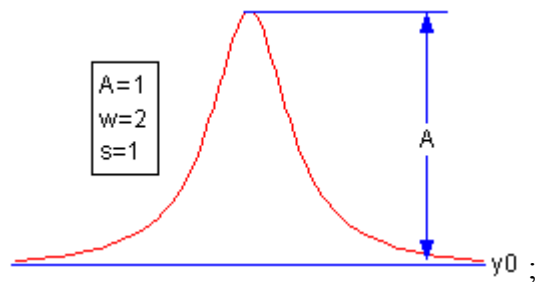


- функції Доніаха-Шуніча (**DoniachSunjic**):



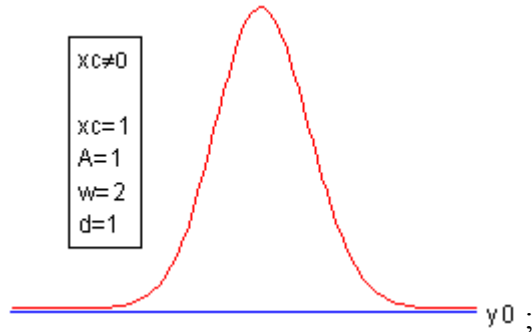
- векторного добутку Гаусіана-Лоренціана (**GaussianLorenCross**):

$$y = y_0 + \frac{A}{1 + e^{0.5(1-s)\left(\frac{x-x_c}{w}\right)^2}} s \left(\frac{x - x_c}{w}\right)^2$$



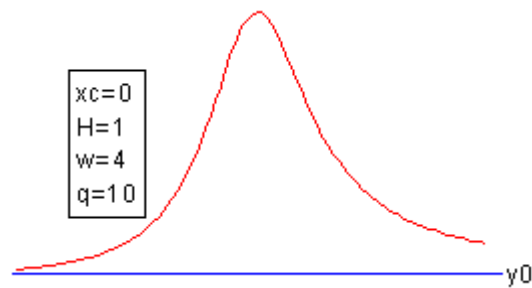
- функції Хаархофа-Ван дер Лінде (**HVL**)

$$y = y_0 + \frac{A e^{-\frac{0.5(x-x_c)^2}{w^2}} w}{d \sqrt{2\pi} x_c \left(e^{1-\frac{d^2}{w^2}} + 0.5 \left(1 + \operatorname{Erf} \left(\frac{x-x_c}{w\sqrt{2}} \right) \right) \right)}$$



- функції Брайта-Вігнера-Фано (**BWF**)

$$y = y_0 + \frac{H \left(1 + \frac{x-x_c}{qw} \right)^2}{1 + \left(\frac{x-x_c}{w} \right)^2}$$



На панелі інструментів поряд з вибором функції для апроксимації спектрів знаходяться наступні кнопки для керування процесом апроксимації:




– **Switch Peak Label** (визначає тип позначки піку);





– **Reorder Peaks** (ця кнопка доступна тільки якщо була застосована кнопка **Sort Peaks**, застосовується для відновлення порядку піків за замовчуванням);





– **Sort Peaks** (відкриває діалогове вікно **Sort Peaks**, де є можливість сортування піків за центром, шириною, амплітудою у зростаючому чи спадаючому порядку);


 – **Fix or release baseline parameters** (визначає чи потрібно фіксувати параметри базової/фонової лінії, якщо параметри фіксовані, то ця кнопка заблокована);


 – **Fix or release peaks center** (визначає чи потрібно фіксувати параметри, що відповідають центрам піків, якщо піки центрів фіксовані, то ця кнопка заблокована);

 – **Fix or release peaks width** (визначає чи потрібно фіксувати параметри, що відповідають центрам піків, якщо піки центрів фіксовані, то ця кнопка заблокована);

 – **Initialize Parameters** (ініціалізація параметрів);

 – **Calculate Chi-Sqr** (обраховує поточне зменшене значення χ^2 -квадрату і показує його у нижній панелі у вкладці **Messages**);

 – **1 Iteration** (проводить одиночну ітерацію);

 – **Fit until converged** (продовжує ітерації до повного апроксимації спектра).

Аналіз та обробка графічних даних. Диференціювання, інтегрування та Фур'є трансформація.

Мета роботи: засвоєння основ аналізу графічних даних.

Завдання роботи:

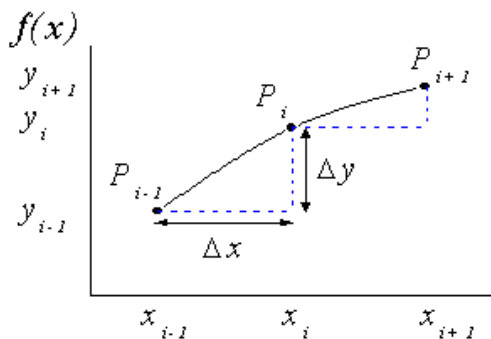
- навчитися диференціювати графічні дані;
- навчитися інтегрувати графічні дані;
- навчитися проводити трансформацію Фур'є сигналів.

Теоретичні відомості

Важливими задачами цифрової обробки спектрів є диференціювання, інтегрування та Фур'є трансформація сигналів.

Диференціювання та інтегрування графічних даних

Диференціал функції визначається як: $f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$. Оскільки величина h достатньо мала, то можна використовувати наближену формулу: $f'(x_i) \approx \frac{f(x_i+h) - f(x_i-h)}{2h}$. Програмне середовище OriginPro обробляє дискретні дані за цією наближеною формулою та обраховує похідну в точці P_i , усереднюючи нахил між точкою та двома її найближчими сусідами:



Похідна функції, яка застосовується до дискретних точок даних може бути

таким чином записана як:
$$f'(x_i) = \frac{1}{2} \left(\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} + \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right)$$
. У випадку коли обрано опцію згладжування при диференціюванні, а X дані рівномірно розподілені, то для обрахування похідної застосовується метод Савицького-Голя. Спочатку виконується поліноміальна регресія на точках даних, причому поліноміальне значення на позиції x може бути обраховане як:
$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + \dots + a_1 x + a_0$$
, де n – поліноміальний порядок, а $a_i, i = 0 \dots n$ – коефіцієнти апроксимації. Потім визначається перша похідна на позиції x як:
$$f'(x) = n a_n x^{n-1} + (n-1) a_{n-1} x^{n-2} + \dots + a_1$$
.

Для вибору опції диференціювання кривої потрібно побудувати її на графіку, а далі в меню **Analysis** обрати пункт **Mathematics** та опцію **Differentiate** (Рис. 7.1).

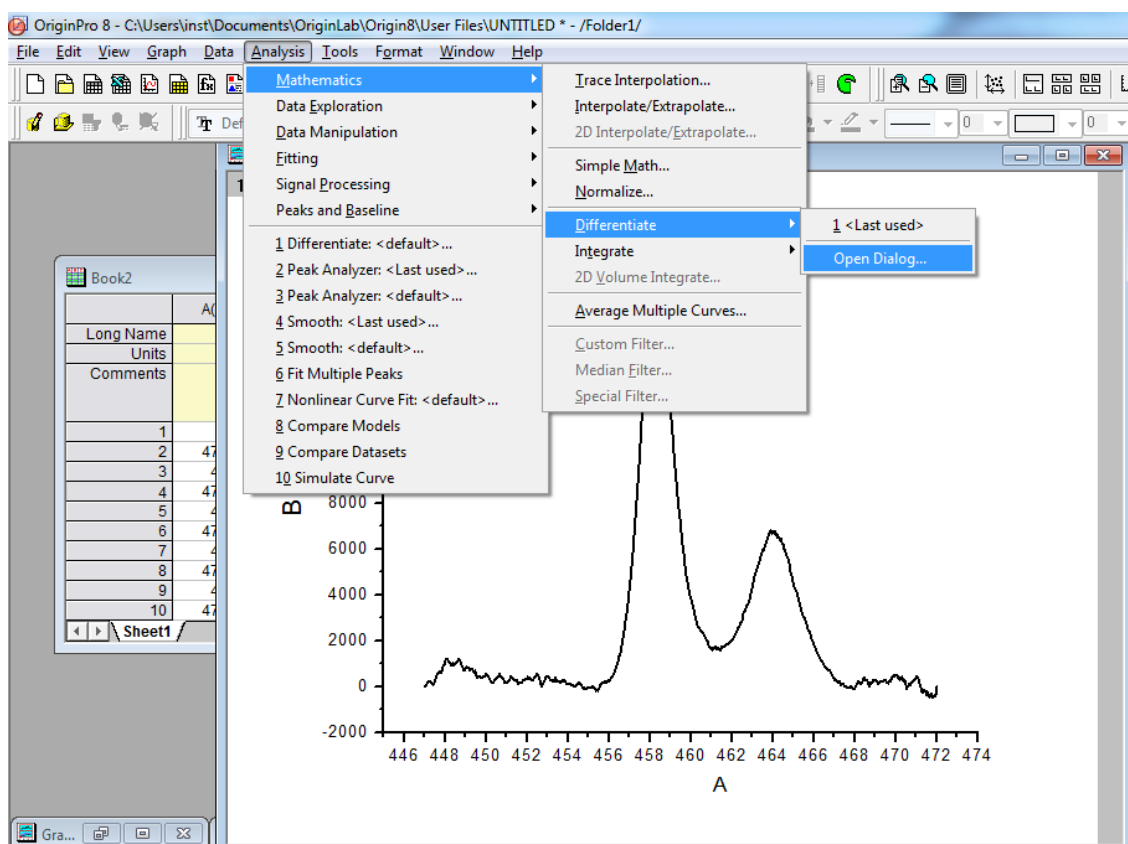
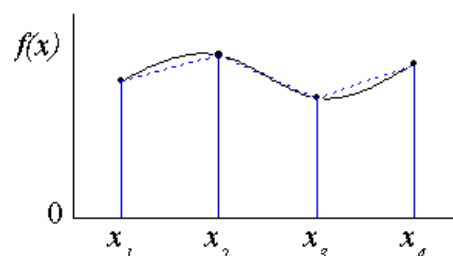


Рисунок 7.1 – Вибір опції диференціювання **Differentiate** кривої.

Далі відкриється діалогове вікно **Mathematics:differentiate** (Рис. 7.2), де зокрема можна обрати порядок похідної (**Derivative Order**) та опцію згладжування (**Smooth**) за методом Савицького-Голя (Savitzky-Golay Smooth). Якщо обрано опцію **Plot Derivative Curve**, то в окремому вікні буде побудовано графік похідної кривої.

Чисельне інтегрування включає в себе обрахування визначеного інтеграла наближеною функцією: $\int_a^b f(x)dx$. Оскільки значення у таблиці даних – дискретні, то в програмному середовищі OriginPro використовують пару суміжних значень для формування трапеції для усереднення площі під



частиною кривої, що визначається двома точками:

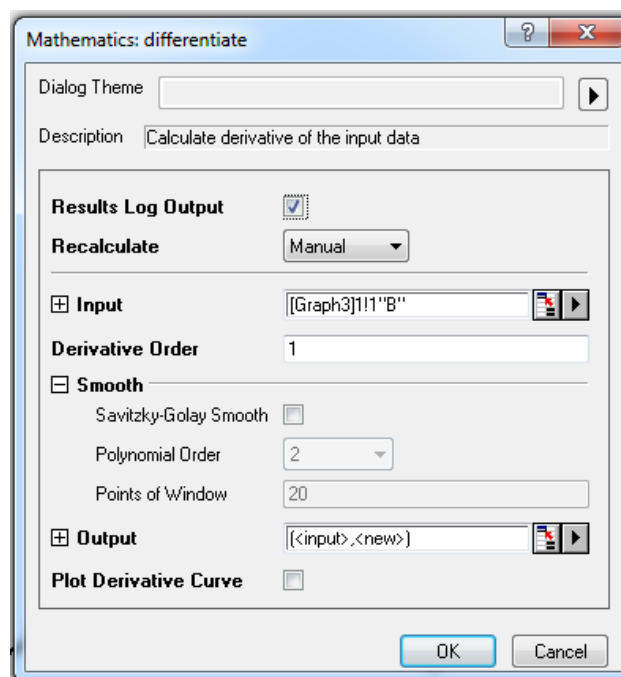


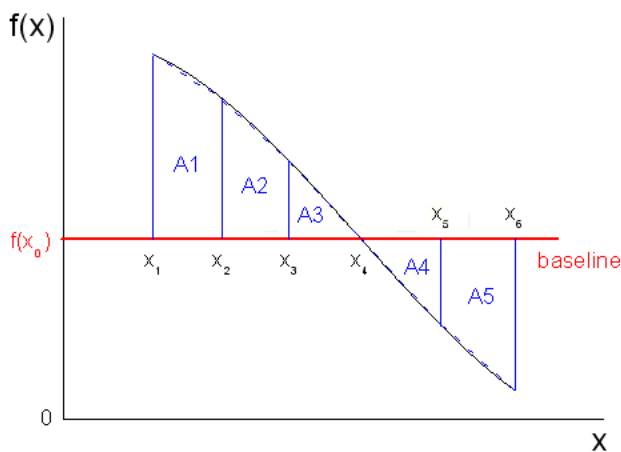
Рисунок 7.2 – Діалогове вікно для диференціювання кривої **Mathematics:differentiate**.

Крива розділена на частини і обраховується сума для кожної трапеції для обрахування інтеграла як: $\int_{x_1}^{x_n} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) \frac{1}{2} [f(x_{i+1}) + f(x_i)]$. Якщо базова лінія задається як $y = f(x_0)$, то математична площа функції $f(x)$ може бути обрахована як:

$$\int_{x_1}^{x_n} [f(x) - f(x_0)] dx \approx \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i) [(f(x_{i+1}) - f(x_0)) + (f(x_i) - f(x_0))]$$

Якщо обраховується сума кожної трапеції, то можна отримати абсолютну площу

$$\int_{x_1}^{x_n} |f(x) - f(x_0)| dx \approx \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i) |[(f(x_{i+1}) - f(x_0)) + (f(x_i) - f(x_0))]|$$



Як показано на рисунку вище базова лінія $y = f(x_0)$ і крива розділена на п'ять трапецій (або трикутників). Площа кожної трапеції (або трикутника) обраховується як: $A_i = \frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i) [(f(x_{i+1}) - f(x_0)) + (f(x_i) - f(x_0))]$. З цього виразу можна визначити A_1 , A_2 та A_3 , які є вищими за базову лінію, як такі, що є додатними, а A_4 та A_5 , які є нижчими за базову лінію, є від'ємними. Таким чином, математична площа кривої визначається як: $A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5$, а абсолютна площа як: $|A_1| + |A_2| + |A_3| + |A_4| + |A_5| = A_1 + A_2 + A_3 - A_4 - A_5$.

Для вибору опції інтегрування кривої потрібно побудувати її на графіку, а далі в меню **Analysis** обрати пункт **Mathematics** та опцію **Integrate** (Рис. 7.3).

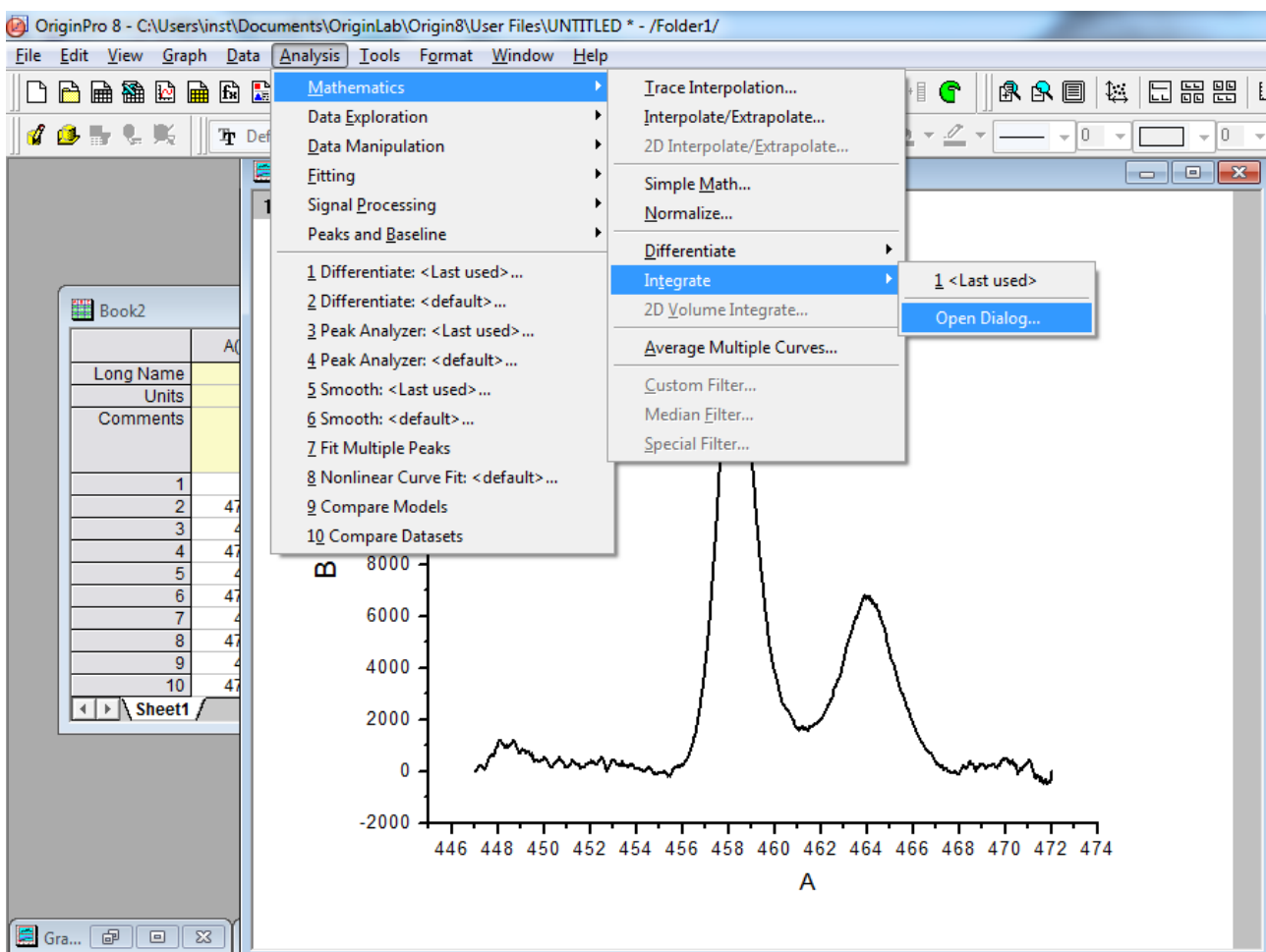


Рисунок 7.3 – Вибір опції інтегрування **Integrate** кривої.

Далі відкриться діалогове вікно **Mathematics:integ1** (Рис. 7.4), де зокрема можна обрати тип площі інтегрування – математична площа (**Mathematical area**) або абсолютна площа (**Absolute area**) та вказати чи потрібно створювати пряму лінію, яка перетинає кінцеві точки та використовує базову лінію для інтегрування (**Use End Points Straight Line as Baseline**). Якщо обрано опцію **Plot Integral Curve**, то в окремому вікні буде побудовано графік похідної кривої.

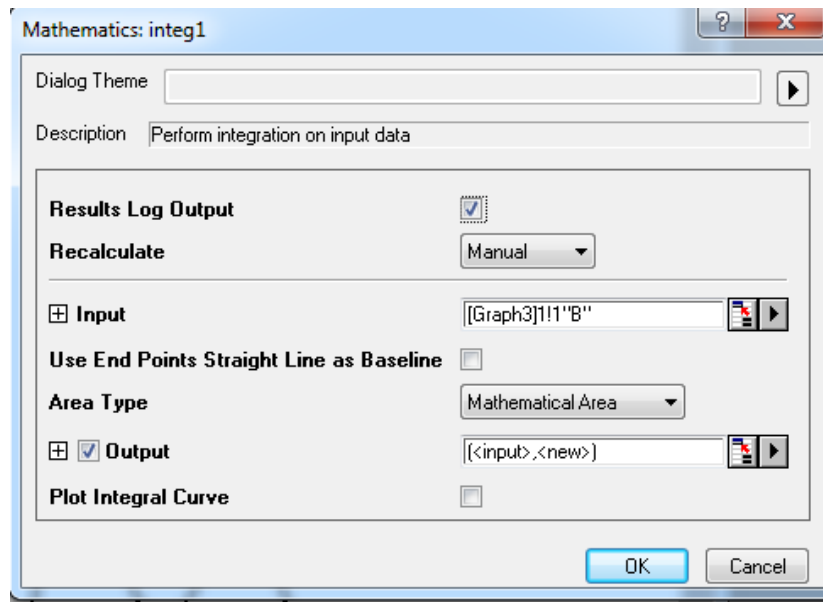


Рисунок 7.4 – Діалогове вікно для інтегрування кривої **Mathematics:integ1**.

Фур'є трансформація графічних даних

Дискретне перетворення Фур'є (DFT) перетворює сигнал у часовій області до його відповідного значення у частотній області. Нехай x_i буде послідовність

довжиною N , тоді DFT є послідовність (F_n) , яка задається як
$$F_n = \sum_{i=0}^{N-1} x_i e^{-\frac{2\pi j}{N} ni}$$
.

Швидке перетворення Фур'є (FFT) є алгоритмом пришвидшеного DFT, який є алгоритмом проріджування за частотою-часом, що має складність $O(n \log n)$.

Віконне перетворення Фур'є застосовується для зменшення ефекту «витоку» (обумовленого наявністю розривів на кінцях часового ряду, які є наслідком кінцевої довжини запису). При застосуванні віконного перетворення Фур'є

сигнал поділяється на «вікна» (відрізки), у межах яких його вважають стаціонарним. Для цього до сигналу застосовують так звану віконну функцію ω , ширина якої дорівнює ширині вікна. Віконне перетворення Фур'є визначається

наступним чином:
$$S(\omega, t) = \int_{n=-\infty}^{\infty} \omega(n-m) f(n) e^{-j\omega n} dn$$
, де $f(n)$ – вихідний сигнал,

$\omega(n-m)$ – віконна функція.

Для вибору опції швидкого перетворення Фур'є сигналу потрібно побудувати його на графіку, а далі в меню **Analysis** обрати пункт **Signal Processing**, опцію **FFT** та підпункт **FFT** (Рис. 7.5). Далі відкриється діалогове вікно **Signal Processing\FFT: fft1** (Рис. 7.6), де в пункті **Options** можна задати наступні типи вікна (**Window**) для FFT:

- **Rectangle** – прямокутне вікно: $w[n] = 1$ для $0 \leq n \leq N - 1$ або 0 в іншому випадку. Дана віконна функція реалізує відмінну роздільну здатність за частотою та найгіршу роздільну здатність за амплітудою.

- **Hanning** – вікно Хенінга: $w[n] = \frac{1}{2}[1 - \cos(\frac{2\pi n}{N-1})]$. Реалізує кращу роздільну здатність за частотою, ніж прямокутне вікно, але гіршу – за амплітудою.

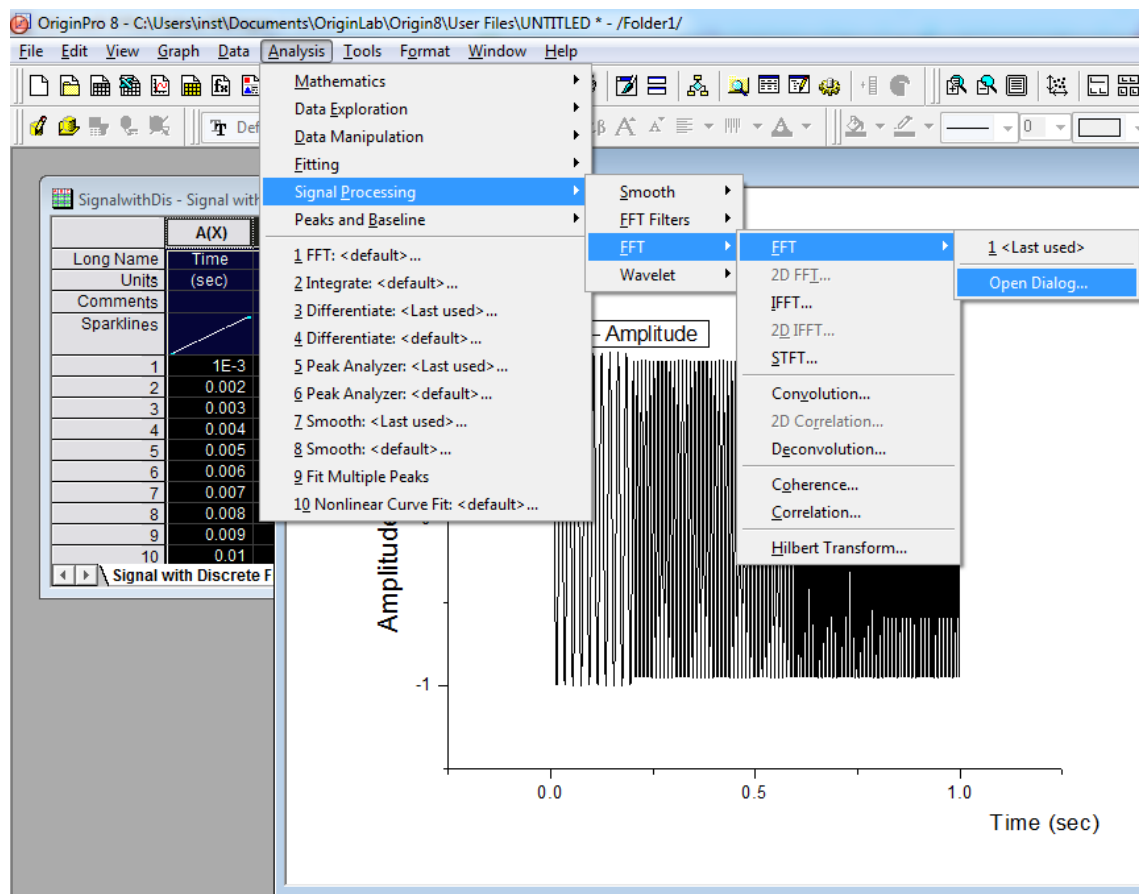


Рисунок 7.5 – Вибір опції **FFT** для швидкого перетворення Фур'є сигналу.

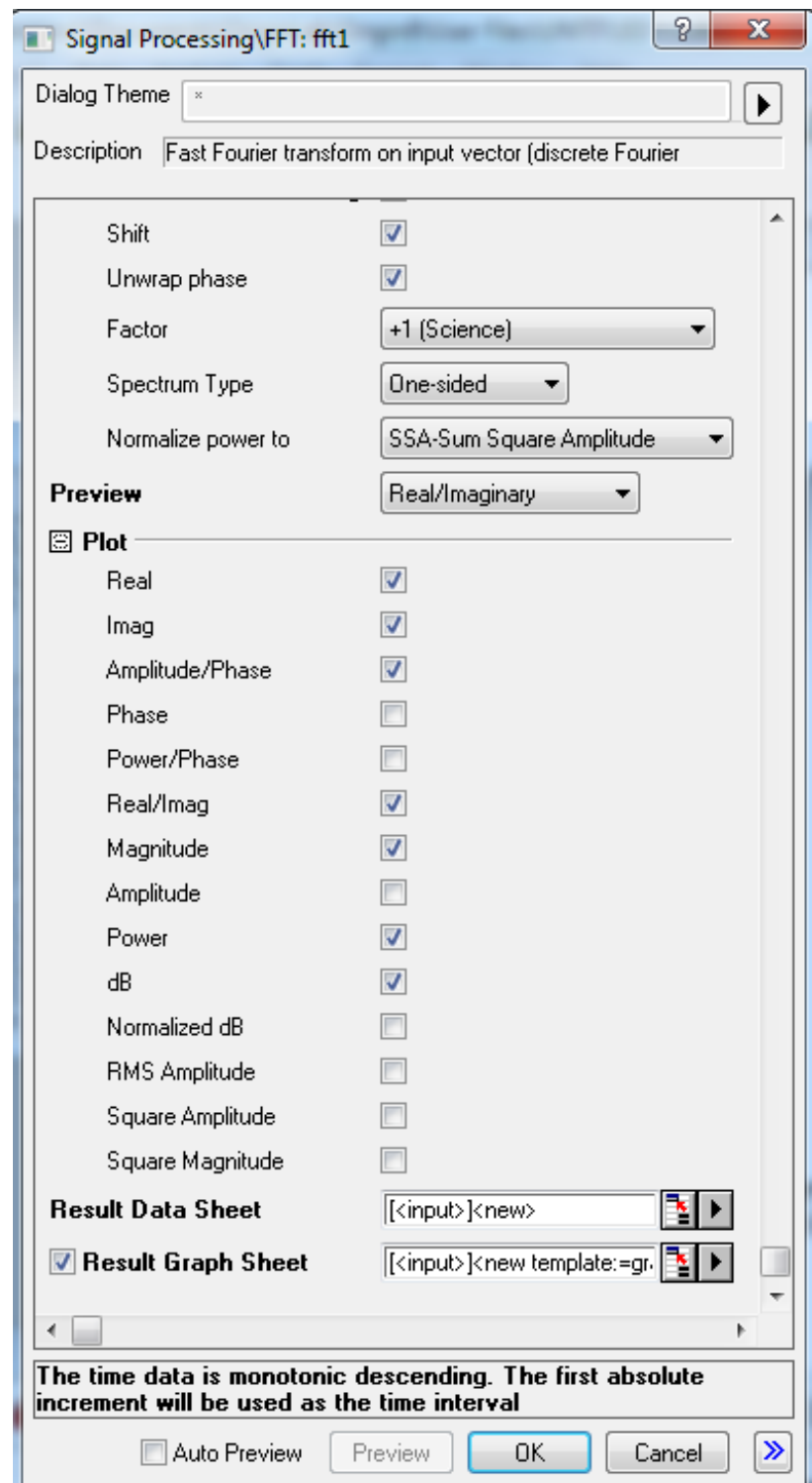


Рисунок 7.6 – Діалогове вікно **Signal Processing\FFT: fft1**. Зліва без розгорнутого меню **Plot**, справа – з розгорнутим меню **Plot**.

- **Hamming** – вікно Хеммінга: $w[n] = 0.54 - 0.46 \cos(\frac{2\pi n}{N-1})$. Має кращу роздільну здатність за частотою, ніж вікно Хенінга.

- **Blackman** – вікно Блекмана: $w[n] = 0.42 - 0.5 \cos(\frac{2\pi n}{N-1}) + 0.08 \cos(\frac{4\pi n}{N-1})$. На відміну від прямокутного вікна забезпечує найкращу роздільну здатність за амплітудою та найгіршу – за частотою.

- **Welch** – вікно Уелча: $w[n] = 1 - \left(\frac{n - \frac{1}{2}(N-1)}{\frac{1}{2}(N+1)} \right)^2$
- **Triangular** – трикутне вікно: $w(n) = \frac{2}{N} \left(\frac{N}{2} - |n - \frac{N}{2}| \right)$
- **Bartlett** – вікно Бартлетта: $w(n) = \frac{2}{N-1} \left(\frac{N-1}{2} - |n - \frac{N-1}{2}| \right)$

Наступна опція у пункті **Options** це **Normalize Re, Im, and Mag** яка визначає чи потрібно нормувати комплексні, дійсні, уявні, абсолютні дані на виході.

Опція **Shift** у пункті **Options** вказує чи має бути результат трансформований таким чином, що компоненти, які мають нижчу частоту, будуть розміщені у центрі.

Ще одна опція у пункті **Options** це **Unwrap phase** – вказує чи має бути розгорнута фаза.

Опис всіх інших функцій даного діалогового вікна детально можна знайти тут: <https://www.originlab.com/doc/Origin-Help/FFT1-Dialog>

Для приклада на Рис. 7.7 зображено вихідний спектр у часовій області (зверху) та результуючий спектр у частотній області (знизу), отриманий із використанням наступних параметрів у діалоговому вікні **Signal Processing\FFT: fft1**: Window: Hamming, Shift ☒, Unwrap phase ☒, Factor: +1 (Science), Normalize power to: SSA-Sum Square Amplitude, Preview: Amplitude, Plot: Amplitude.

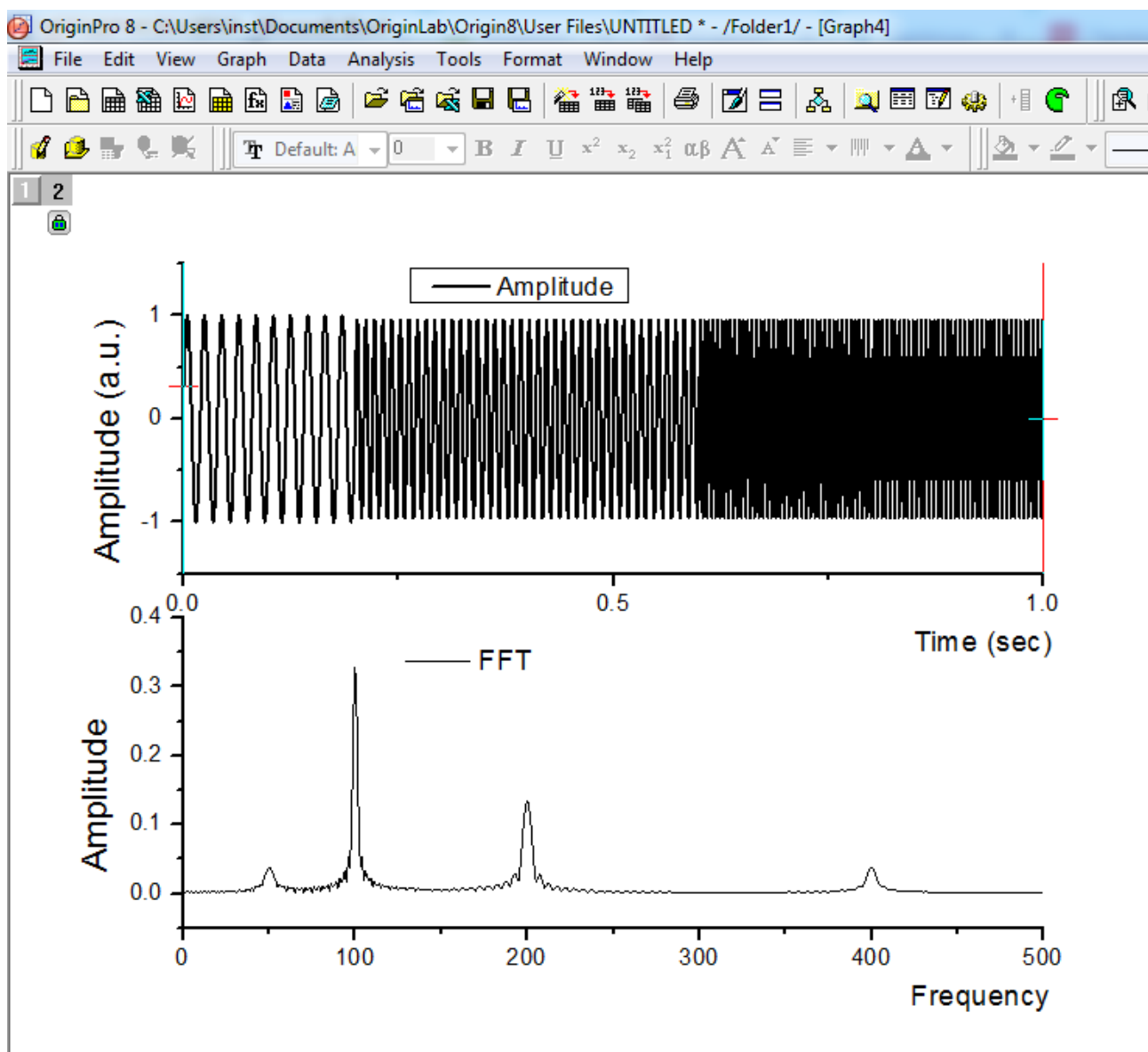


Рисунок 7.7 – Вихідний спектр у часовій області (зверху) та результуючий спектр у частотній області (знизу), отриманий із використанням діалогового вікна **Signal Processing\FFT: fft1**.

Список використаної літератури

1. Исакова О. П. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Учебно-методическое пособие. / О. П. Исакова, Ю. Ю. Тарасевич. – Астрахань: ОГОУ ДПО «АИПКП», 2007. – 68 с.
2. Богданов А. А. Визуализация данных в Microcal Origin / А. А. Богданов. – Москва: «Альтекс-А», 2003. – 112 с.
3. Поликарпов В. М. Современные методы компьютерной обработки экспериментальных данных: учебное пособие / В. М. Поликарпов, И. В. Ушаков, Ю. М. Головин. – Тамбов: ТГТУ, 2006. – 84 с.
4. Менжевицкий В. С. Графическое отображение данных с использованием пакета Origin. Учебно-методическое пособие / В. С. Менжевицкий. – Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2013. – 56 с.
5. Исакова О. П. Обработка и визуализация данных физических экспериментов с помощью пакета Origin. Анализ и обработка спектров: Учебно-методическое пособие / О. П. Исакова, Ю. Ю. Тарасевич, Ю. И. Юзюк. – Ростов-на-Дону: Южный федеральный университет, 2007. – 76 с.
6. Качан С. М. Базовая инструкция по использованию прикладного пакета программ “ORIGIN” для численного анализа и графической обработки данных / С. М. Качан. – Минск: Белорусский национальный технический университет, 2016. – 18 с.
7. Савельев К. Д. Построение графиков функций с помощью пакета ORIGIN / К. Д. Савельев. – Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2018. – 17 с.
8. Смит Р. А. Использование программного пакета Origin для обработки экспериментальных данных: учеб. пособие / Р. А. Смит, О. С. Андранович, Е. Ю. Демьянцева. – Санкт-Петербург: ВШТЭ СПбГУПТД, 2018. – 45 с.
9. Сергиенко А. Б. Цифровая обработка сигналов: учеб. пособие / А. Б. Сергиенко. – Санкт-Петербург: БХВ-Петербург, 2011. – 768 с.
10. Origin Help [Электронный ресурс] – Режим доступа до ресурсу: <https://www.originlab.com/doc/Origin-Help/>